



ZÁPADOČESKÁ
UNIVERZITA
V PLZNI

AJFY - PŘÍKLADY

scan sbírky příkladů

příklad ke Zkoušce

příklad ke Zkoušce a
ZÁPOČTU

VII. KVANTOVÁ MECHANIKA

Kvantová mechanika je základní fyzikální teorie, bez níž není možný popis takřka žádného systému z hlediska jeho mikrostruktury.

V úvodních příkladech ukážeme některé výrazné nedostatky klasické fyziky, které vedly k jejímu opuštění na mikroúrovni.

1. Ukažte: že planetární atom je nestabilní. Spočtete, za jak dlouho spadne elektron v atomu vodíku ze své charakteristické vzdálenosti (10^{-10} m) na jádro (10^{-15} m). Komentujte přesnost výsledku.

Řešení: Budeme uvažovat přibližně kruhovou dráhu elektronu kolem jádra, s poloměrem, který se postupně, díky ztrátám energie na záření, relativně pomalu zmenšuje.

Podmínka kruhové dráhy má zřejmě tvar

$$ma = \frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r^2} .$$

Energie elektronu je proto dána vztahem

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r} = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r} ,$$

kde jsme za kinetickou energii dosadili z podmínky kruhové dráhy. Tato energie se bude zmenšovat díky vyzařování a ve shodě s uvedeným vztahem se zmenšuje i poloměr dráhy elektronu.

Podle Larmorova vztahu platí

$$dE = -\frac{2}{3} \frac{e^2 a^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot c^3} dt .$$

Dosadíme-li sem za energii a za zrychlení z předchozích vztahů, dostaneme

$$\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r^2} \cdot dr = \frac{2}{3m^2 c^3} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^3 \cdot \frac{1}{r^4} dt$$

Odtud

$$r^2 dr = - \frac{4}{3m^2 c^3} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 dt$$

a po integraci

$$r^3 = r_0^3 - \frac{4}{m^2 c^3} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \cdot t$$

Vzhledem k tomu, že výsledná vzdálenost je o 5 řádů menší než počáteční, můžeme rozměr jádra zanedbat, a pro dobu pádu na jádro dostáváme

$$t_0 = \frac{m^2 \cdot c^3 \cdot r_0^3}{4} \left(\frac{4\pi \cdot \epsilon_0}{e^2} \right)^2,$$

což číselně dá $t_0 \approx 10^{-10}$ s.

Atom tedy zaniká za velice krátkou dobu. Výpočet není "zcela" přesný. Přibližně pro $r < 10^{-14}$ m bychom měli uvažovat relativistické korekce. (Energie elektronu je porovnatelná s klidovou.) Pro velké rychlosti také nelze zanedbat další typy záření kromě započteného dipólového. Vzhledem ke krátkosti pádu nelze však očekávat, že by se započtením těchto korekcí stal planetární atom stabilní.

2. Najděte: klasickou podmínku pro fotoelektrický jev. Elektron předpokládejte vázaný v parabolické potenciálové jámě.

Řešení: Potenciálovou jámu, v níž je na počátku "uvězněn" elektron, volme ve

$$\begin{aligned} \text{tvaru} \quad V(x) &= \frac{1}{2} kx^2 - \frac{1}{2} ka^2 && \text{pro } |x| < a \\ &= 0 && \text{pro } |x| > a \end{aligned}$$

Pro uskutečnění fotoelektrického jevu musí tedy být frekvence budícího pole blízká rezonanční a doba působení pole dostatečně dlouhá.

Určité výsledky týkající se neklasického chování fyzikálních systémů zjistila již tzv. stará kvantová teorie, tj. kvantová teorie období před Schrödingerovou rovnicí.

3. Měděná kulička o poloměru 10 cm je osvětlena dvěma zdroji stejného výkonu o vlnových délkách 200 nm a 300 nm.

Určete: jaký náboj bude mít kulička v důsledku ozařování, kolik fotonů se na to spotřebuje a jaký výkon je potřebný, dojde-li k nabití za 1 ms a pohltí-li se každý stý foton?

Potřebná data: Výstupní práce mědi 4.47 eV, Planckova konstanta 1.05×10^{-34} J.s, rychlost světla 3×10^8 m/s, elementární náboj 1.6×10^{-19} C a permitivita vakua 8.8×10^{-12} F/m.

Řešení: K nabíjení kuličky dochází v důsledku fotoelektrického jevu. K vyvolání tohoto jevu je dostatečná pouze energie UV záření o vlnové délce 200 nm. Energie těchto UV fotonů činí $2\pi \cdot \hbar \cdot c / \lambda$, kde \hbar je Planckova konstanta, c rychlost světla a λ vlnová délka záření (číselně ≈ 6 eV). Při uvolnění elektronů z kuličky bude však třeba překonat nejen výstupní práci z kovu, ale i dodatečnou potenciální energii elektrického přitahování. Uvolňování se zastaví tehdy, když potenciál kuličky nabude hodnoty $V = (2\pi \cdot \hbar \cdot c / \lambda - A) / e$ (≈ 1.5 V), což odpovídá náboji $Q = C \cdot V = 4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot a \cdot V$ (číselně $Q \approx 10^{-11}$ C), kde $C = 4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot a$ je kapacita kuličky o poloměru a .

Druhý zdroj přímo elektrony uvolnit nemůže, zůstává však otázka, zda by nemohl dodat energii elektronu již z kovu uvolněnému. (To se týká i jiných fotonů prvního zdroje.) Přímo je takový jev nemožný: uvolněný elektron totiž samostatně

nemůže foton pohltit a energetický zisk (ale může to být i ztráta) při rozptylu je nepatrný (viz příklad 5.). Že elektron nemůže pohltit foton, ukazuje úvaha provedená v těžišťovém systému: po pohlcení by v něm měl být elektron v klidu a mít vyšší energii než měl v pohybu - to samozřejmě není možné. Vícečásticové procesy jsou při uvažovaných počtech fotonů velmi nepravděpodobné, a proto zanedbatelné.

Další fotony tedy nepomáhají a výše uvedený výsledek je v pořádku. Uvolněný náboj odpovídá Q/e elektronům ($\approx 10^8$) a vyžaduje tedy $N \approx 10^{10}$ 200 nm fotonů, čemuž odpovídá energie 10^{-8} J ($E = N \cdot 2\pi \cdot \hbar \cdot c / \lambda$) a tedy výkon $P = E/t \approx 10^{-5}$ W. Dalších 1.5×10^{10} fotonů z druhého zdroje je uvolněno zbytečně.

4. Určete: v Bohrově modelu vodíkpodobného atomu rychlost, polohu, frekvenci a energii elektronu na n -té dráze, dále intenzitu elektrického pole působícího na n -té dráze a magnetickou indukci magnetického pole vytvořeného elektronem na n -té dráze v místě jádra.

Potřebná data: Planckova konstanta 1.05×10^{-34} J.s, rychlost světla 3×10^8 m/s, hmotnost elektronu 0.9×10^{-30} kg, elementární náboj 1.6×10^{-19} C, permitivita vakua 8.8×10^{-12} F/m a permeabilita vakua $4\pi \times 10^{-7}$ N/A².

Řešení: Bohrov model využívá tři vztahů:

1) podmínky kruhové dráhy

$$\frac{m \cdot v^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot r^2},$$

kde Z je nábojové číslo jádra a ostatní veličiny mají standardní význam,

2) vztahu pro energii

$$W = \frac{1}{2} m \cdot v^2 - \frac{Ze^2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot r} = -\frac{Ze^2}{8\pi \cdot \epsilon_0 \cdot r}$$

(poslední rovnost vyplývá z předchozího vztahu) a

3) kvantovací podmínky pro moment hybnosti

$$r.m.v = n.\hbar \quad (n \text{ je přirozené číslo}).$$

Spočteme-li z první rovnice $m.v^2$ a z třetí rovnice $m.v$, pak vydělením dostaneme

$$v_n = \frac{1}{n} \cdot \frac{Ze^2}{4\pi.\epsilon_0.\hbar} = \frac{1}{n} Z.\alpha.c,$$

kde jsme zavedli tzv. elektromagnetickou interakční konstantu $\alpha = e^2/(4\pi.\epsilon_0.\hbar.c) \approx 1/137$. Číselně odtud dostáváme $v_n = Z/n.c/137$. Pro nepříliš vysoká Z jde tedy o nerelativistické rychlosti a model vyhovuje. Výpočet pro vyšší Z vyžaduje použití teorie relativity (což by samozřejmě bylo náročnější).

Z kvantovací podmínky máme pak okamžitě

$$r_n = n^2 \frac{1}{Z\alpha} \cdot \frac{\hbar}{mc} = n^2 \frac{1}{Z\alpha} \lambda \quad (\text{číselně: } n^2/Z \times 5 \times 10^{-11} \text{ m}),$$

($\lambda = \hbar/mc$ je tzv. Comptonovská vlnová délka) a odtud pro energii

$$W_n = -\frac{1}{n^2} \cdot \frac{Z^2}{2} \alpha^2 \cdot (m.c^2) \quad (-Z^2/n^2 \times 13.6 \text{ eV})$$

a frekvenci

$$\omega_n = \frac{v_n}{r_n} = \frac{1}{n^3} Z^2 \alpha^2 \cdot \frac{mc^2}{\hbar} \quad (Z^2/n^3 \times 4 \times 10^{16} \text{ s}^{-1}).$$

Elektrostatické pole působící na elektron je ovšem dáno vztahem

$$E_n = \frac{Ze}{4\pi.\epsilon_0.r_n^2} = \frac{1}{n^4} Z^3 \alpha^3 \frac{m^2 c^3}{e\hbar} \quad (Z^3/n^4 \times 5 \times 10^{11} \text{ V/m}).$$

Pro magnetické pole ve středu smyčky vytvořené elektronem pak

$$B_n = \frac{1}{2} \mu_0 \frac{I_0}{r_n} = \frac{1}{2\epsilon_0 c^2} \cdot \frac{ev_n}{2\pi r_n} \cdot \frac{1}{r_n} = \frac{1}{n^5} Z^3 \alpha^4 \cdot \frac{m^2 c^2}{e\hbar} \quad (Z^3/n^5 \times 12.3 \text{ T}).$$

Zde jsme dosadili za $\mu_0 = 1/\epsilon_0 c^2$ a za proud $I_n = e/T = e.\omega_n/2\pi = e.v_n/(2\pi.r_n)$

(T je doba oběhu elektronu).

$$\lambda' - \lambda = 4\pi \cdot \hbar / (m \cdot c) \cdot \sin^2(\theta / 2) = 4\pi \cdot \lambda_C \cdot \sin^2(\theta / 2) ,$$

kde $\lambda_C = \hbar / (m \cdot c) = 3.867 \times 10^{-13}$ m je tzv. Comptonova vlnová délka elektronu.

Efekt je podstatný, jen pokud Comptonova vlnová délka není příliš malá vůči vlnové délce dopadajícího fotonu.

Největší předaná energie odpovídá největšímu zvětšení vlnové délky fotonu (rozptýlený foton má pak nejmenší frekvenci a tedy nejmenší energii), což nastane pro $\theta = \pi$, tj. pro zpětný odraz.

Úhel ϕ pohybu elektronu zjistíme na základě vztahů

$$p_e \cdot \sin \phi = \hbar \cdot \omega' / c \cdot \sin \theta$$

$$p_e \cdot \cos \phi = \hbar \cdot \omega / c - \hbar \cdot \omega' / c \cdot \cos \theta$$

(zákon zachování hybnosti rozepsaný do složek). Dosadíme-li do 2. vztahu za $\hbar \cdot \omega / c$ (viz dlouhý vztah výše) a dělíme-li druhou rovnici první, dostaneme pro hledaný úhel

$$\operatorname{ctg} \phi = \left[1 + \hbar \cdot \omega / (m \cdot c^2) \right] \cdot (1 - \cos \theta) / \sin \theta = \left[1 + \hbar \cdot \omega / (m \cdot c^2) \right] \cdot \operatorname{tg}(\theta / 2) ,$$

kde jsme použili standardních úprav goniometrických funkcí pro poloviční úhel.

6. Určete: de Broglieovu vlnovou délku elektronu, který je v elektronovém mikroskopu urychlen napětím 100 kV. Pro jaké napětí stačí provést výpočet nerelativisticky s chybou menší 1% ?

Potřebná data: Planckova konstanta 1.05×10^{-34} J.s, rychlost světla 3×10^8 m/s, hmotnost elektronu 0.9×10^{-30} kg a elementární náboj 1.6×10^{-19} C.

Řešení: Pro de Broglieovu vlnovou délku platí vztah $\lambda_{dB} = 2\pi \cdot \hbar / p$, kde p je hybnost elektronu, kterou určíme ze vztahu

$$p^2 = (E/c)^2 - (m \cdot c)^2 ,$$

v němž E je energie a m hmotnost elektronu.

Pro energii ze zákona zachování energie máme

$$E = m.c^2 + e.U,$$

kde U je urychlovací napětí, takže

$$p^2 = 2m.e.U + (e.U/c)^2$$

$$a \quad \lambda_{dB} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{(2m.e.U + e^2.U^2/c^2)}} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2meU}} \cdot \frac{1}{\sqrt{[1 + e.U/(2m.c^2)]}}$$

První faktor odpovídá nerelativistickému výrazu, druhý je relativistický korekční faktor. Pro malá napětí, kdy $eU \ll 2mc^2$ lze psát

$$[1 + e.U/(2m.c^2)]^{-1/2} \approx 1 - e.U/(4m.c^2)$$

a protože $4m.c^2 \approx 2 \text{ MeV}$, dostaneme jednocentní mez přibližně pro $U = 20 \text{ kV}$. V našem případě je napětí větší a je třeba použít úplnou formuli.

Číselně dostáváme $\lambda_{dB} = 3.7 \times 10^{-12} \text{ m}$ (nerelativistický výpočet dá $3.9 \times 10^{-12} \text{ m}$).

V kvantové teorii se budeme často setkávat s interferencí.

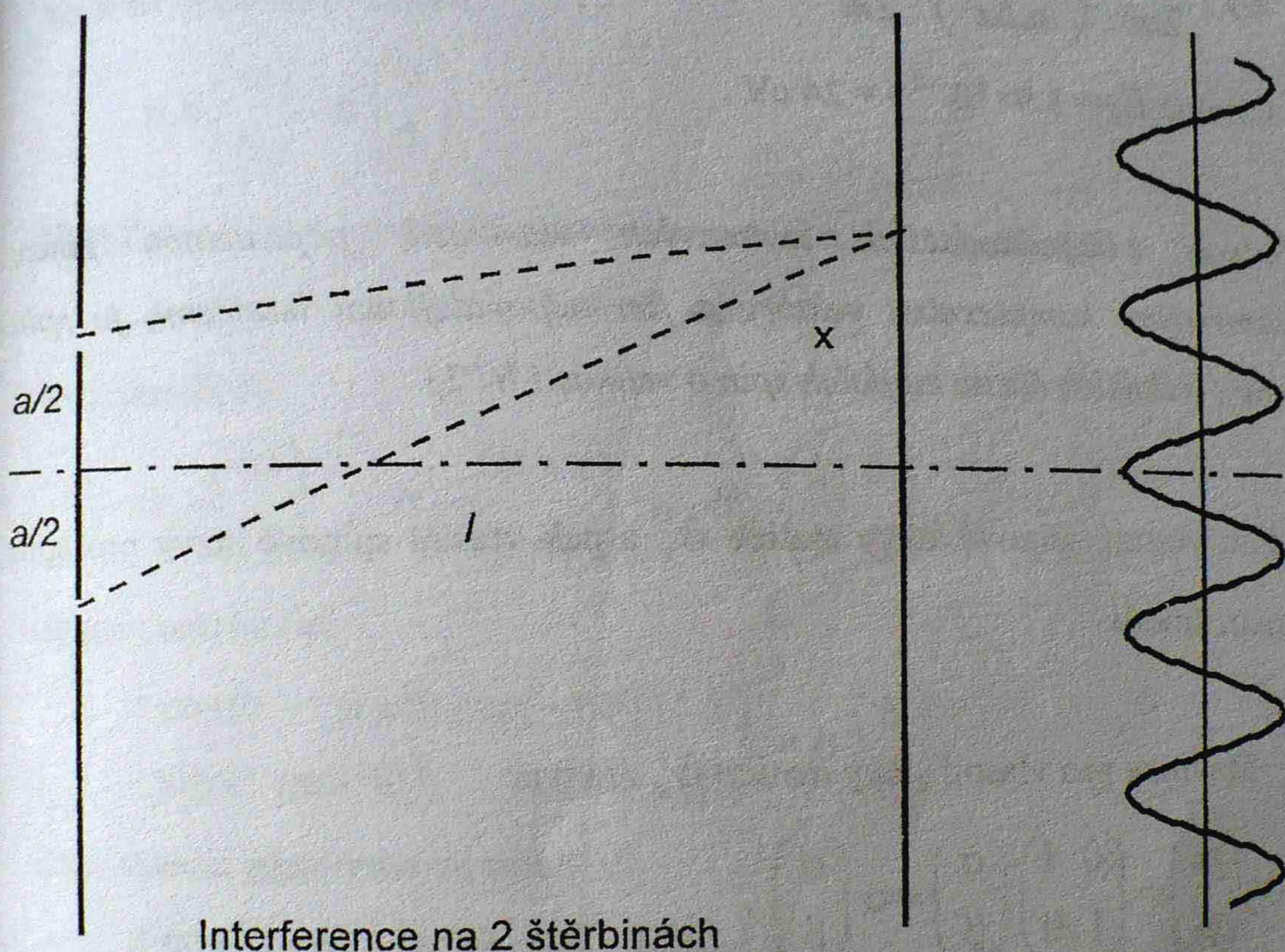
7. Zjistěte: jak při difrakci na dvojštěrbíně závisí vzdálenosti maxim na vzdáleném stínítku od energie dopadajících částic. Určete, jaká je energie dopadajících elektronů, je-li vzdálenost štěrbin $25 \mu\text{m}$, vzdálenost stínítka 1 m a vzdálenost maxim $10 \mu\text{m}$.

Potřebná data: Planckova konstanta $1.05 \times 10^{-34} \text{ J.s}$, hmotnost elektronu $0.9 \times 10^{-30} \text{ kg}$, elementární náboj $1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$.

Řešení: Štěrbiny umístíme do vzdálenosti $\pm a/2$ od osy uspořádání. Intenzita dopadajícího svazku částic na stínítku bude pak záviset na vzdálenosti x od osy podle vztahu

$$I = A \cdot |\exp(ik.l_1)/l_1 + \exp(ik.l_2)/l_2|^2,$$

kde l_1 a l_2 jsou vzdálenosti místa na stínítku od štěrbin, k vlnové číslo charakterizující částice a veličina A charakterizuje intenzitu toku částic od jedné štěrbin.



Je-li $l \gg a$ i $l \gg x$, kde l je kolmá vzdálenost stínítka od roviny štěrbin, pak lze ve jmenovatelích psát $l_1 \approx l_2 \approx l$ a výraz přepsat ve tvaru

$$I = A/l^2 \cdot |1 + \exp[ik \cdot (l_1 - l_2)]|^2.$$

Protože

$$l_2 - l_1 = \sqrt{[l^2 + (x + a/2)^2]} - \sqrt{[l^2 + (x - a/2)^2]} \approx a \cdot x / l$$

je

$$I \approx 2A/l^2 \cdot [1 + \cos(k \cdot a \cdot x / l)].$$

Vzdálenost maxim Δx je dána vztahem $(k \cdot a/l)$. $\Delta x = 2\pi$, a protože vlnové číslo souvisí s hybností vztahem $k=p/\hbar$, dostáváme pro energii částic

$$E_k = \frac{p^2}{2m} = \left(\frac{2\pi \cdot \hbar \cdot l}{a \cdot \Delta x} \right)^2 \cdot \frac{1}{2m}$$

Číselně $E_k = 3.9 \times 10^{-18} \text{ J} = 24 \text{ eV}$.

Jednou z nejjednodušších kvantových vlastností, popsatelnou pouze dvourozměrnými komplexními vektory a jim odpovídajícími maticemi, je spin elektronů (a dalších částic majících spin o velikosti $\hbar/2$).

8. Najděte vlastní spinové stavy matice $\hat{\sigma}_x$ a pak vlastní spinové stavy pro spin v obecném směru.

Řešení: Rovnice pro vlastní stavy matice $\hat{\sigma}_x$ má tvar

$$\hat{\sigma}_x \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \sigma \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix},$$

kde σ je vlastní hodnota matice $\hat{\sigma}_x$. Rozepsání této maticové rovnice vede na složkové rovnice $\beta = \sigma \cdot \alpha$ a $\alpha = \sigma \cdot \beta$. Po dosazení z druhého vztahu do prvního dostáváme $\beta = \sigma^2 \cdot \beta$, odkud $\sigma = \pm 1$ (musí být $\beta \neq 0$, neboť důsledkem $\beta = 0$ je $\alpha = 0$ a my hledáme nenulová řešení).

Příslušné vlastní vektory mají pak tvar

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{a} \quad \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix},$$

volíme-li $\alpha = 1$.

Oba vektory mají velikost $\sqrt{2}$, takže normovanými řešeními jsou

$$1/\sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{a} \quad 1/\sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Hledání spinového stavu se spinem ve směru daném jednotkovým vektorem \mathbf{n} vede na obdobnou rovnici

$$\mathbf{n} \cdot \hat{\sigma} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \sigma \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

Vyjádříme-li jej pomocí úhlové vzdálenosti Θ a azimutu Φ , máme

$$\mathbf{n} = (\sin\Theta \cdot \cos\Phi, \sin\Theta \cdot \sin\Phi, \cos\Theta).$$

Uvážíme-li, že

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{a} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

dostaneme rovnici

$$\begin{pmatrix} \cos\Theta & \sin\Theta \cdot \exp(-i\Phi) \\ \sin\Theta \cdot \exp(i\Phi) & -\cos\Theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \sigma \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}.$$

Tuto rovnici přepíšeme ve tvaru

$$\begin{pmatrix} \cos\Theta - \sigma & \sin\Theta \cdot \exp(-i\Phi) \\ \sin\Theta \cdot \exp(i\Phi) & -\cos\Theta - \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = 0$$

z něhož je vidět, že nenulové řešení existuje právě tehdy, je-li determinant matice soustavy roven nule.

Tato podmínka má tvar

$$\sigma^2 - \cos^2\Theta - \sin^2\Theta = 0,$$

$$\text{tj.} \quad \sigma = \pm 1.$$

Z první rovnice pak dostaneme

$$\beta \cdot \sin\Theta \cdot \exp(-i\Phi) = \alpha \cdot (\pm 1 - \cos\Theta).$$

Použijeme-li vyjádření pomocí polovičních úhlů, dostaneme

$$\beta \cdot \sin\left(\frac{1}{2}\Theta\right) \cdot \cos\left(\frac{1}{2}\Theta\right) = + \alpha \cdot \sin^2\left(\frac{1}{2}\Theta\right) \cdot \exp(i\Phi)$$

resp.

$$\beta \cdot \sin\left(\frac{1}{2}\Theta\right) \cos\left(\frac{1}{2}\Theta\right) = -\alpha \cdot \cos^2\left(\frac{1}{2}\Theta\right) \exp(i\Phi)$$

Odtud při volbě $\alpha = 1$ dostáváme řešení

$$\begin{pmatrix} 1 \\ \operatorname{tg}\left(\frac{1}{2}\Theta\right) \exp(i\Phi) \end{pmatrix} \quad \text{a} \quad \begin{pmatrix} 1 \\ -\operatorname{ctg}\left(\frac{1}{2}\Theta\right) \exp(i\Phi) \end{pmatrix}$$

pro $\sigma = 1$ resp. -1 . Získané vektory nejsou normovány. Protože

$$\sqrt{\left(1 + \operatorname{tg}^2\left(\frac{1}{2}\Theta\right)\right)} = 1/\cos\left(\frac{1}{2}\Theta\right) \quad \text{a} \quad \sqrt{\left(1 + \operatorname{ctg}^2\left(\frac{1}{2}\Theta\right)\right)} = 1/\sin\left(\frac{1}{2}\Theta\right)$$

mají normovaná řešení tvar

$$\begin{pmatrix} \cos\left(\frac{1}{2}\Theta\right) \\ \sin\left(\frac{1}{2}\Theta\right) \exp(i\Phi) \end{pmatrix} \quad \text{a} \quad \begin{pmatrix} \sin\left(\frac{1}{2}\Theta\right) \\ -\cos\left(\frac{1}{2}\Theta\right) \exp(i\Phi) \end{pmatrix}$$

První vlastní vektor odpovídá spinu ve směru \mathbf{n} , druhý ve směru $-\mathbf{n}$. Oba vlastní vektory jsou vzájemně kolmé.

Předchozí řešení pro $\hat{\sigma}_x$ jsou ovšem speciálním případem tohoto řešení, jak se přesvědčíme, položíme-li $\Theta = \pi/2$ a $\Phi = 0$.

9. Proud elektronů dopadá na dva za sebou kolmo na směr šíření umístěné SG (Sternovy-Gerlachovy) magnety. První propouští elektrony se spinem nahoru, druhý elektrony se spinem dolů.

Určete: jakou relativní intenzitu bude mít proud elektronů po průchodu oběma SG magnety. Jak se tato intenzita změní, vložíme-li mezi tyto magnety další magnet ve směru svírajícím s předchozími úhel 90° ? Jaká intenzita projde, vložíme-li mezi vstupní a výstupní magnet n magnetů orientovaných ve směrech měnících se postupně o úhel $\pi/(n+1)$? Proveďte limitu pro případ $n \rightarrow \infty$.

Řešení: Označme intenzitu záření po průchodu prvním magnetem I_0 . Amplituda pravděpodobnosti pro průchod druhým magnetem je rovna

odkud

$$a_0 = -2iA \sin \kappa / (\Delta E - 2iA \sin \kappa).$$

Nalezená řešení dovolují mikročástici, aby se nacházela kdekoli na řetězci s nezanedbatelnou pravděpodobností. Vzhledem k jejich charakteru (tok se měnící se na odražený a pokračující tok) jim říkáme *rozptylová řešení*.

V případě neporušeného nekonečného řetězce existují pouze řešení uvedeného tvaru $\exp(\pm i\kappa n)$, protože řešení rovnic má být v nekonečnu omezené.

V případě řetězce s poruchou lze pracovat i s řešeními tvaru $\exp(\pm \kappa n)$, pokud vlevo bude řešení tvaru $\exp(\kappa n)$, omezené v $-\infty$, a vpravo tvaru $\exp(-\kappa n)$, omezené v $+\infty$.

Takové řešení můžeme dostat z předchozího následujícím trikem: položíme $\kappa = i\kappa'$ ($\kappa' > 0$). Pak podmínkou vhodně se chovajícího řešení je $r = 0$, kde 1 je koeficient u dopadající vlny, což se zdá nesmyslné. Pro určité hodnoty parametru κ' může ale dojít k tomu, že amplitudy r a t jsou nekonečné.

Vynásobíme-li pak řešení vhodným výrazem, můžeme dosáhnout toho, aby hodnoty veličiny r a t byly konečné a člen u dopadající vlny byl roven nule.

Podmínkou nekonečnosti r a t je

$$\Delta E - 2iA \sin \kappa = \Delta E + 2A \sinh \kappa' = 0$$

a tímto výrazem je také vhodné řešení vynásobit.

Řešení "sedící" v okolí poruchy vyhovuje, pokud je omezené, a tak je tomu i v případě, pokud je $\kappa' > 0$, a tedy $\Delta E < 0$. Uvedená řešení jsou, přidáme-li řešení blízká poruše zprava, všechna.

Heisenbergovy vztahy neurčitosti jsou jedním ze základních principů kvantové teorie.

19. Ukažte, že nutnou a postačující podmínkou současné měřitelnosti dvou pozorovatelných (veličin) je komutativita odpovídajících operátorů.

Řešení : Celkový důkaz vyžaduje provedení dvou poddůkazů : že současná měřitelnost vede ke komutativitě operátorů a naopak komutativita operátorů umožňuje současnou měřitelnost.

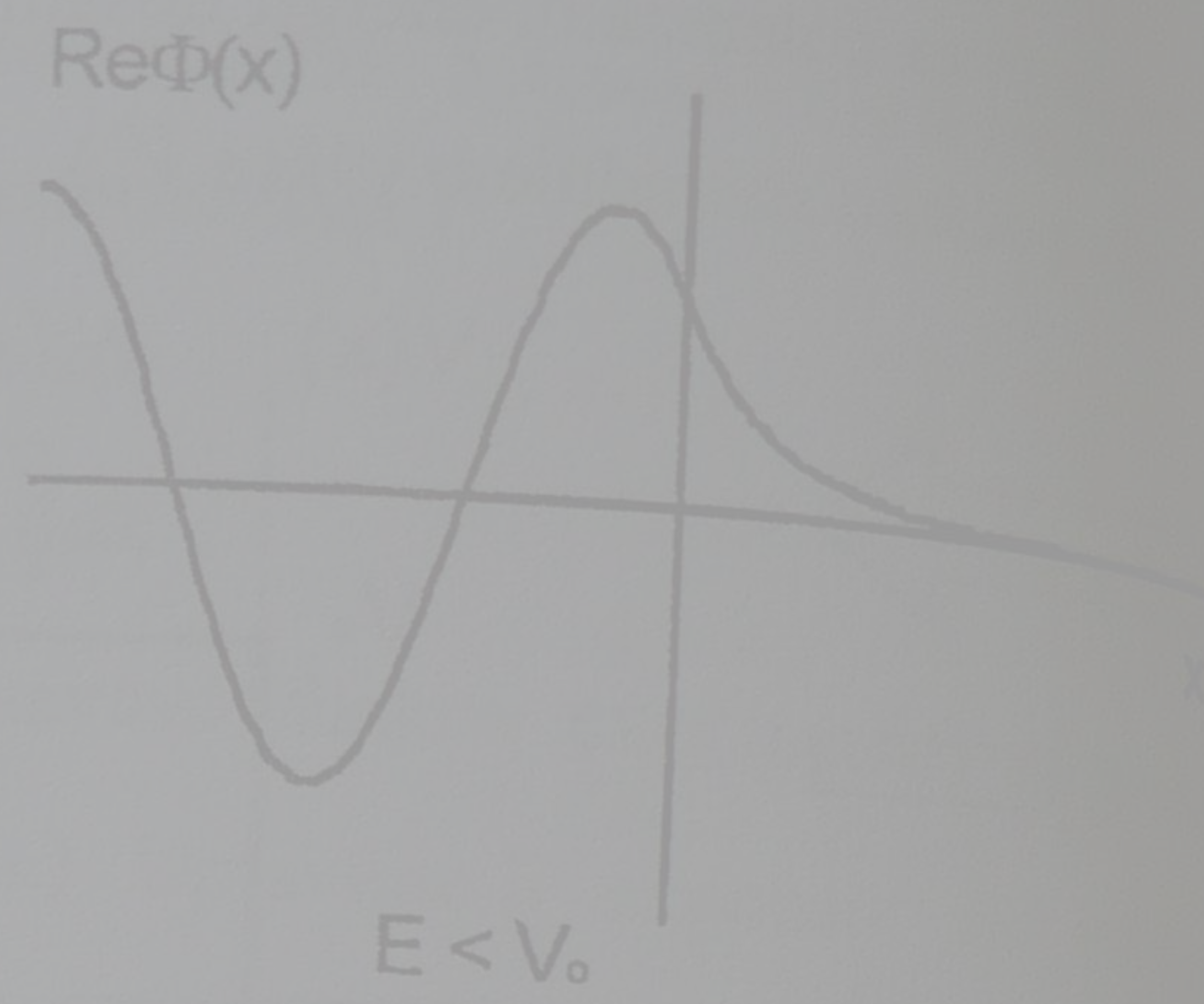
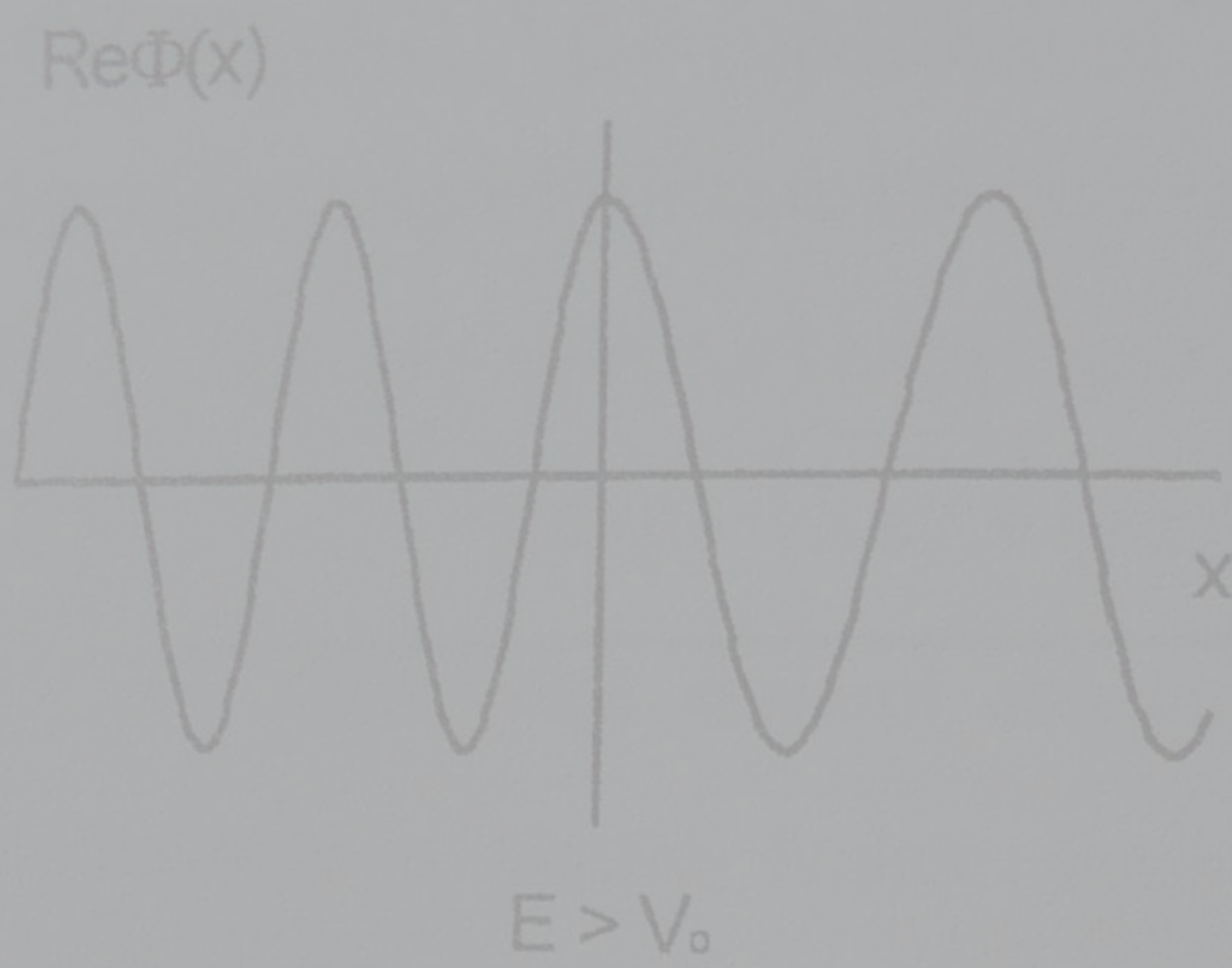
Dokažme nejdříve první a pak druhé tvrzení.

Jsou-li pozorovatelné současně měřitelné, pak to znamená, že existuje báze vektorů Ψ_{ab} (kde indexy a a b probíhají možné hodnoty pozorovatelných \mathcal{A} a \mathcal{B}) v prostoru stavů taková, že $\hat{A}\Psi_{ab} = a\Psi_{ab}$ a $\hat{B}\Psi_{ab} = b\Psi_{ab}$ (písmena se stříškou odpovídají příslušným operátorům). Odtud snadno $\hat{A}\hat{B}\Psi_{ab} = \hat{B}a\Psi_{ab} = ab\Psi_{ab} = \hat{B}\hat{A}\Psi_{ab}$ pro všechny vektory báze, a tedy pro libovolný vektor. Komutativnost je dokázána.

Nechť naopak operátory pozorovatelných komutují. Vyřešme problém vlastních hodnot a vlastních stavů pro pozorovatelnou \mathcal{A} . Uvažme nyní podprostor odpovídající vlastní hodnotě a a zvolme v něm nějaký vektor Ψ . Protože operátory pozorovatelných \mathcal{A} a \mathcal{B} komutují, bude vektor $\hat{B}\Psi$ ležet v témže podprostoru jako vektor Ψ . ($\hat{A}(\hat{B}\Psi) = \hat{A}\hat{B}\Psi = \hat{B}\hat{A}\Psi = a\hat{B}\Psi$) Vlastní vektory pozorovatelné \mathcal{B} leží tedy v tomto podprostoru a můžeme vytvořit společnou bázi typu Ψ_{ab} , pro dané a . Zopakováním konstrukce pro každé a dostaneme úplnou bázi. Pozorovatelné jsou tedy současně měřitelné.

20. Ukažte: jak souvisí přesnost měření polohy s možnou přesností měření hybnosti ve "fotonovém" mikroskopu a jak zjištění, kterou štěrbinou prochází elektron při dvojštěrbinovém pokusu, ovlivní interferenční obraz.

Řešení: Obě úvahy jsou obdobné. Rozlišovací schopnost mikroskopu je při apertuře (vstupním úhlu) Φ rovna $\Delta x \approx \lambda / \sin \Phi$, kde λ je vlnová délka fotonu. Protože foton prochází někudy objektivem, je neurčitost x -ové složky hybnosti



Případ $E < V_0$ dostaneme okamžitě substitucí $k' = ik''$.
 $k''^2 = 2m \cdot (V_0 - E) / \hbar^2$. Řešení v oblasti vpravo exponenciálně klesá podle vztahu
 $\Phi = 2k / (k + ik'') \cdot \exp(-k'' \cdot x)$,
 v oblasti vlevo máme původní vztah.
 Mikročástice jen exponenciálně málo proniká do oblasti schodu. V tomto případě je ovšem $R = 1$.

26. Najděte: stacionární řešení pro mikročástici v nekonečně hluboké potenciálové jámě. Najděte amplitudu rozložení hybnosti pro tyto stavy. Spočítejte číselně energii pro elektron v jámě šířky 10^{-10} m.
 Potřebná data: Planckova konstanta 1.05×10^{-34} J.s, hmotnost elektronu 0.9×10^{-30} kg, elementární náboj 1.6×10^{-19} C.

Řešení: Volme kraje jámy v místech $x = 0$ a $x = L$ a potenciální energii rovnou nule uvnitř a rovnou nekonečnu vně jámy. Jediné možné řešení vně jámy je ovšem $\Phi = 0$ (jen tehdy může mít člen $V(x) \cdot \Phi$ význam). Rovnice uvnitř jámy má pak tvar

$$-\hbar^2 / 2m \cdot d^2\Phi / dx^2 = E \cdot \Phi$$

s řešením tvaru

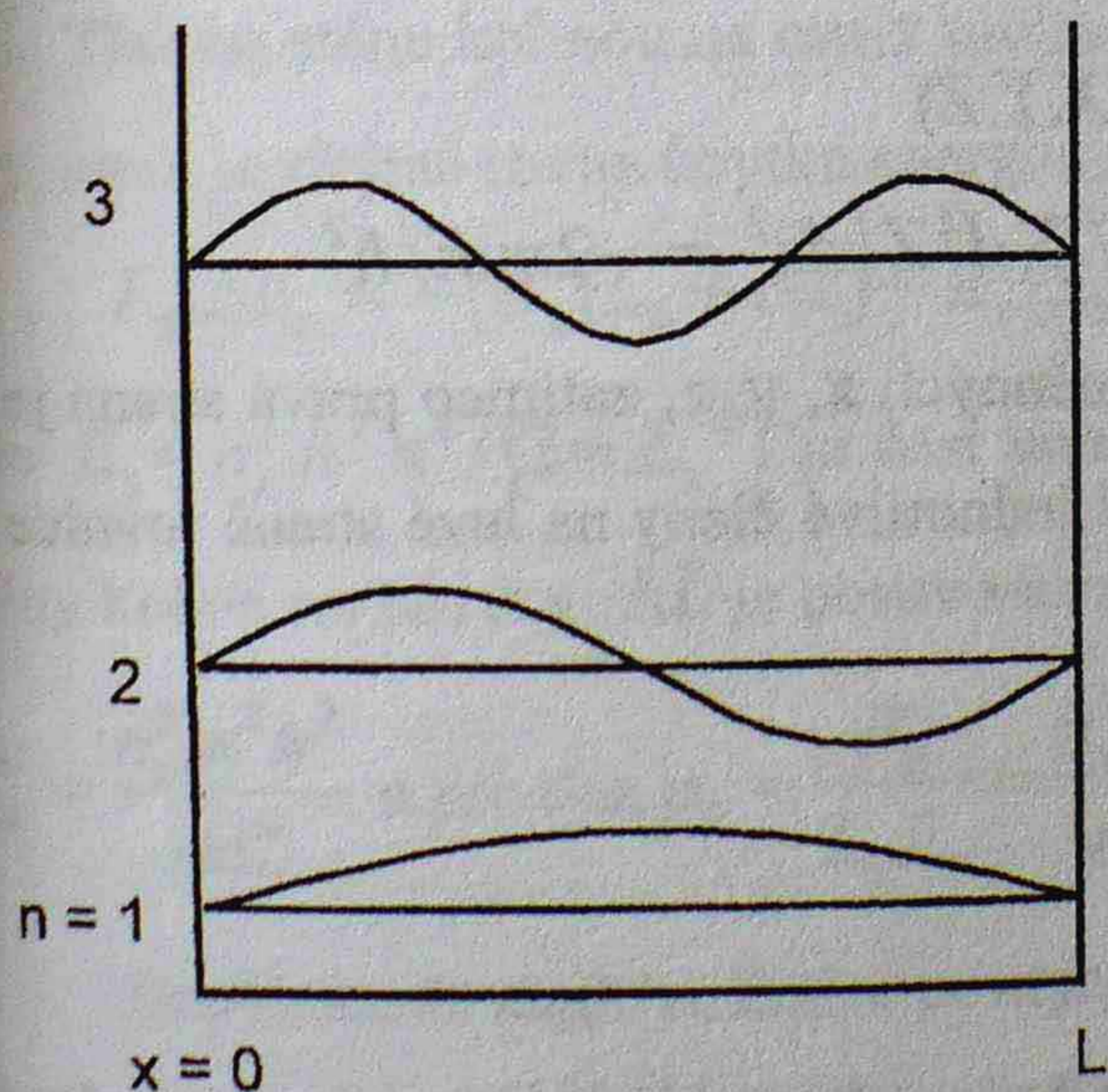
$$\Phi = A \cdot \sin(k \cdot x) + B \cdot \cos(k \cdot x), \quad \text{kde } k^2 = 2m \cdot E / \hbar^2.$$

Zbývá uvážit standardní podmínky. Jejich charakter je poněkud odlišný oproti případům konečných nespojitostí. Jak vypadají, odhadneme na základě chování řešení pro potenciálový schod (příklad 25.). Zjevně v limitě $k'' \rightarrow \infty$ (odpovídající $V_0 \rightarrow \infty$) zůstává řešení spojitě, ale derivace už spojitá není.

V našem případě proto uvážíme pouze spojitost funkce: Spojitost v bodě 0 vede na $B = 0$, zatímco spojitost v bodě L vede k podmínce $A \cdot \sin(k \cdot L) = 0$. Nenulovost řešení pak vyžaduje, aby $A \neq 0$, proto musí být

$$k \cdot L = n \cdot \pi \quad n = 1, 2, \dots$$

(řešení s $n = 0$ je nulové a řešení se záporným n jsou až na znaménko rovna řešením s kladným $-n$.)



Dosazením za k dostaneme pro energii

$$E = \hbar^2 \pi^2 \cdot n^2 / (2m \cdot L^2)$$

(číselně $n^2 \times 6.0 \times 10^{-18} \text{ J} = n^2 \times 37.8 \text{ eV}$) a řešení tvaru

$$\sqrt{(2/L)} \cdot \sin(n \cdot \pi \cdot x / L).$$

Faktor $\sqrt{(2/L)}$ odpovídá normování:

$$A^2 \cdot \int_0^L \sin^2(n \cdot \pi \cdot x / L) \cdot dx = 1.$$

Amplituda pravděpodobnosti pro hybnost je dána skalárním součinem

$$a(p) = \int_0^L \sqrt{(2/L)} \cdot \sin(n \cdot \pi \cdot x / L) \cdot \exp(-ip \cdot x / \hbar) / \sqrt{(2\pi \cdot \hbar)} \cdot dx$$

Užijeme-li Eulerův vztah pro $\sin(n \cdot \pi \cdot x / L)$, dostaneme po integraci

$$a(p) = 1 / \sqrt{(\pi \cdot \hbar \cdot L)} \cdot \frac{[1 - (-1)^n \cdot \exp(-ip \cdot L / \hbar)]}{[(n \cdot \pi / L)^2 - (p / \hbar)^2]} \cdot (n \cdot \pi / L)$$

(Použili jsme $\exp(i.n\pi) = (-1)^n$.) Rozdělení hybnosti je tedy nenulové takřka všude (!), s maximem pro $p = n.\pi\hbar / L$.

27. Najděte: energetické stavy mikročástice v nekonečné trojrozměrné jámě tvaru kvádrů. Odhadněte tlak působící na její stěnu. Odhad provedte číselně pro elektron, krychli o hraně velikosti 10^{-10} m a základní stav.

Řešení: Schrödingerova rovnice pro danou úlohu má tvar

$$-\hbar^2/2m \cdot \Delta\Phi = E \cdot \Phi \quad \text{pro } 0 < x < L_x, 0 < y < L_y, 0 < z < L_z$$

a vně jámy je vlnová funkce zřejmě nulová.

Uvnitř jámy je vhodné uvažovat řešení tvaru

$$\Phi(x, y, z) = X(x) \cdot Y(y) \cdot Z(z),$$

což vede na rovnici (po vydělení výrazem $X \cdot Y \cdot Z$)

$$1/X \cdot d^2 X / dx^2 + 1/Y \cdot d^2 Y / dy^2 + 1/Z \cdot d^2 Z / dz^2 = -2m \cdot E / \hbar^2.$$

Jednotlivé členy závisejí postupně na proměnných x, y, z , zatímco pravá strana je konstantní. To je možné jen tehdy, jsou-li jednotlivé členy na levé straně rovnice konstantní, čili

$$d^2 X / dx^2 + k_x^2 \cdot X = 0$$

$$d^2 Y / dy^2 + k_y^2 \cdot Y = 0$$

$$d^2 Z / dz^2 + k_z^2 \cdot Z = 0$$

a ovšem

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2).$$

(Konstanty volíme jako kladné - řešení se zápornými konstantami nevyhovuje.)

Pro funkci X máme okrajové podmínky $X(0) = X(L) = 0$. X tedy splňuje rovnici pro jednorozměrnou nekonečnou jámu. Je tedy

$$X = \sqrt{2/L_x} \cdot \sin(n_x \cdot \pi \cdot x / L_x)$$

$$k_x = n_x \cdot \pi / L_x$$

a obdobně

$$Y = \sqrt{(2/L_y)} \cdot \sin(n_y \cdot \pi \cdot y / L_y)$$

$$k_y = n_y \cdot \pi / L_y$$

$$Z = \sqrt{(2/L_z)} \cdot \sin(n_z \cdot \pi \cdot z / L_z)$$

$$k_z = n_z \cdot \pi / L_z,$$

a tedy

$$\Phi = \sqrt{(8/V)} \cdot \sin(n_x \cdot \pi \cdot x / L_x) \cdot \sin(n_y \cdot \pi \cdot y / L_y) \cdot \sin(n_z \cdot \pi \cdot z / L_z),$$

kde $V = L_x L_y L_z$ je objem jámy. Odpovídající energie je pak

$$E = \hbar^2 \pi^2 / 2m \cdot (n_x^2 / L_x^2 + n_y^2 / L_y^2 + n_z^2 / L_z^2),$$

což pro krychli dá

$$E = \hbar^2 \pi^2 / (2m \cdot L^2) \cdot (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2).$$

(Řešení se zápornými konstantami vedou na kombinaci hyperbolických funkcí, která se nikdy nemůže nulovat ve dvou bodech. Proto taková řešení nevyhovují.)

Tlak na stěnu kolmou na osu x určíme na základě vyjádření pro práci tlakové síly, která je zřejmě rovna úbytku energie. Jest

$$F_x \cdot \Delta L_x = - [E_x(L_x + \Delta L) - E_x(L_x)]$$

kde $E_x = n_x^2 \cdot \hbar^2 \pi^2 / (2m \cdot L_x^2)$ je část energie, která by se měnila při přesouvání stěny kolmé na osu x a ΔL je posuv ve směru této osy. Odtud dostáváme pro sílu

$$F_x = \frac{n_x^2 \cdot \pi^2 \hbar^2}{m L_x^3} \text{ a pro tlak } p_x = \frac{F_x}{L_y L_z} = \frac{n_x^2 \cdot \pi^2 \hbar^2}{m \cdot V L_x^2}. \text{ Číselně } p \approx 10^{13} \text{ Pa.}$$

Doplňme, že např. ve fyzice pevných látek bývá zvykem úlohu modifikovat. Uvažujeme místo jedné jámy nekonečně jam periodicky rozmístěných v prostoru. Pracujeme pak s obdobným, ale přece jen odlišným řešením ve tvaru

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}),$$

které se ukazuje výhodnější než řešení typu sinus. (Zvolená vlnová funkce je normována na 1 v oblasti jámy.)

Řešení pak musejí mít také předpokládanou periodicitu (např.

$$\Psi(x + L_x, y, z) = \Psi(x, y, z)).$$

Znamená to tedy, že

$$k_x L_x = n_x 2\pi, \quad k_y L_y = n_y 2\pi, \quad k_z L_z = n_z 2\pi,$$

kde n_x, n_y, n_z mohou být libovolná celá čísla. Proti předcházejícímu případu máme díky výskytu nulových a záporných hodnot parametrů n „osmkrát více“ řešení. Řešení jsou ale rozložena s osmkrát menší hustotou.

Energie je pak dána vztahem

$$E = (2\pi\hbar)^2 / 2m \cdot (n_x^2 / L_x^2 + n_y^2 / L_y^2 + n_z^2 / L_z^2),$$

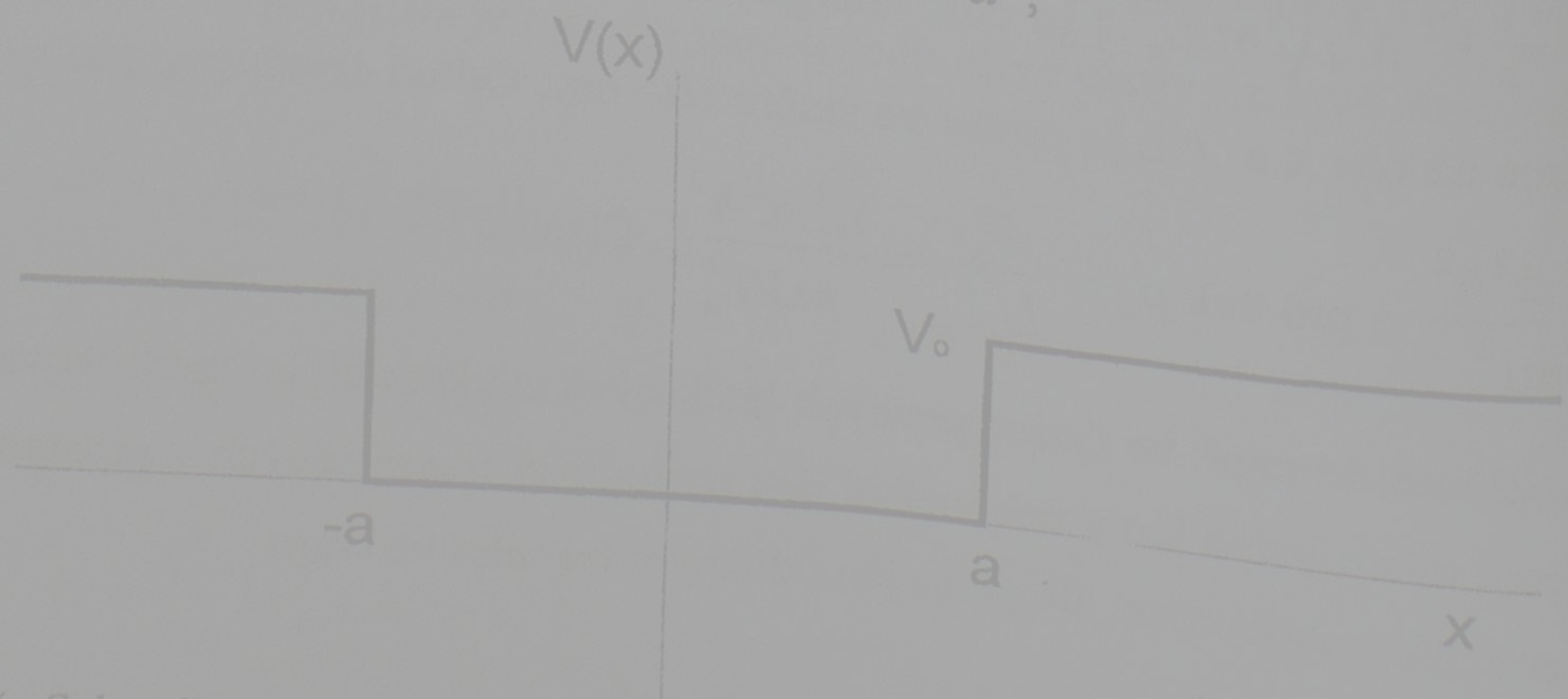
o faktor 4 jinak než v předchozím řešení.

28. Najděte: energie a vlnové funkce vázaných stavů mikročástice v jednorozměrné hranaté potenciálové jámě konečné hloubky.

Řešení: Potenciální energii budeme volit ve tvaru

$$V(x) = 0 \quad \text{pro } |x| < a$$

$$= V_0 > 0 \quad \text{pro } |x| > a,$$

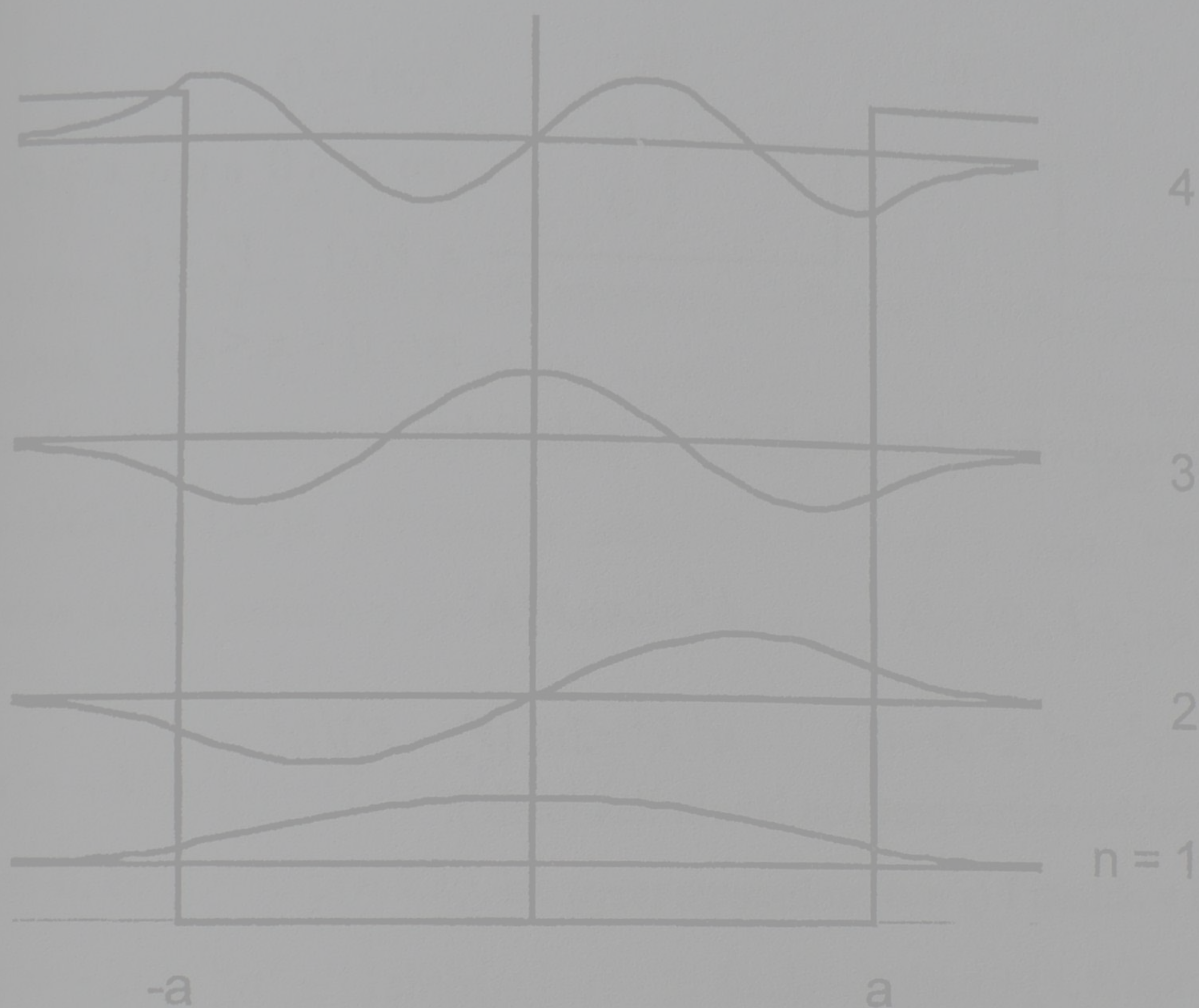


takže Schrödingerova rovnice

$$-\hbar^2 / 2m \cdot d^2\Phi / dx^2 + V(x) \cdot \Phi = E \cdot \Phi$$

bude mít při $|x| < a$ tvar

$$d^2\Phi / dx^2 + k^2 \cdot \Phi = 0 \quad k^2 = 2m \cdot E / \hbar^2$$

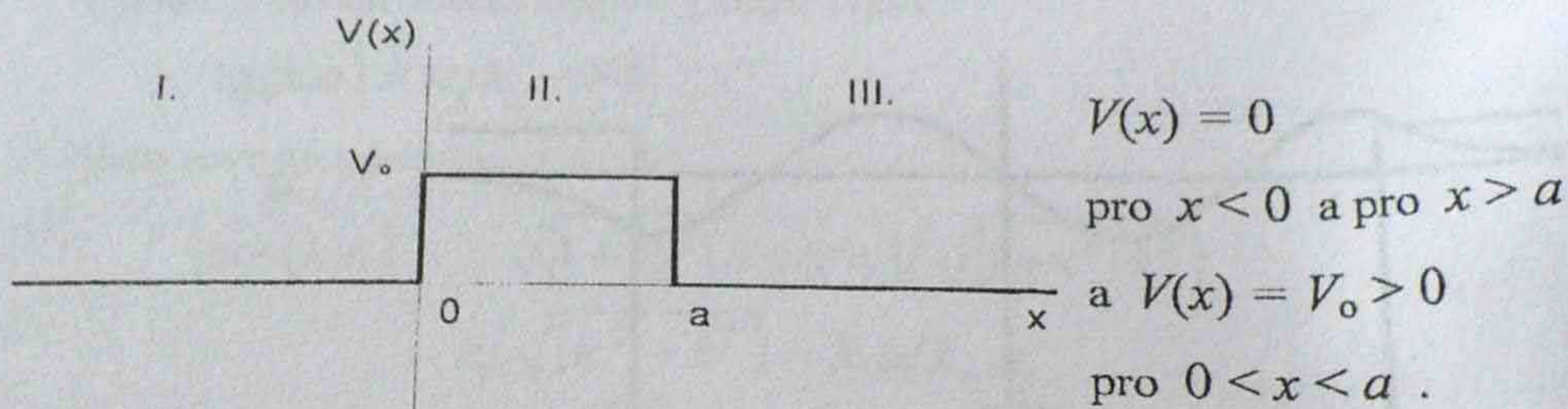


Vlastní funkce jsou tedy buď sudé nebo liché, přičemž sudé a liché funkce se, uvažujeme-li energetické stavy zdola nahoru, střídají, jak je to vidět z výrazu pro energii a z pořadí kvadrantů. Z umístění vlnového čísla k v příslušném kvadrantu též vyplývá, že n -tá vlnová funkce má uvnitř jámy n "hrbů". Vně jámy ve všech případech řešení exponenciálně klesají k nule.

29. Najděte: pravděpodobnost tunelování hranatým potenciálovým valem. Najděte přibližné vyjádření pro "tlustý" val. Odhadněte číselně pravděpodobnost tunelování elektronů v atomárních systémech a nukleonů v jaderných. Odhadněte tuto pravděpodobnost také pro makroskopický objekt.

Potřebná data: Planckova konstanta 1.05×10^{-34} J.s, hmotnost elektronu a nukleonu je rovna 0.9×10^{-30} kg, resp. 1.7×10^{-27} kg, elementární náboj je 1.6×10^{-19} C.

Řešení: Potenciální energii budeme volit ve tvaru



Případ tunelování odpovídá $E < V_0$, takže Schrödingerova rovnice bude mít vně bariéry tvar

$$d^2\Phi/dx^2 + k^2 \cdot \Phi = 0 \quad k^2 = 2m \cdot E / \hbar^2$$

a uvnitř

$$d^2\Phi/dx^2 - n^2 \cdot k^2 \cdot \Phi = 0 \quad n^2 \cdot k^2 = 2m \cdot (V_0 - E) / \hbar^2$$

(parametr n můžeme interpretovat jako index lomu).

Řešení v oblasti I ($x < 0$) volíme ve tvaru

$$\Phi_I = \exp(ik \cdot x) + r \cdot \exp(-ik \cdot x)$$

(jednotková intenzita dopadu, r je koeficient odrazu), v prostřední oblasti II ($0 < x < a$) máme

$$\Phi_{II} = \alpha \cdot \exp(n \cdot k \cdot x) + \beta \cdot \exp(-n \cdot k \cdot x)$$

a v oblasti III za valem ($x > a$)

$$\Phi_{III} = t \cdot \exp[ik \cdot (x - a)] ,$$

protože nepředpokládáme vlnu zprava (zde jsme ještě vhodným způsobem volili fázi t). (Srovnejte tuto volbu s příkladem 25.)

Podmínky spojitosti a spojité derivace v bodech 0 a a vedou k rovnicím

$$1 + r = \alpha + \beta$$

$$t = \alpha \cdot G + \beta / G$$

$$ik \cdot (1 - r) = n \cdot k \cdot (\alpha - \beta)$$

$$ik \cdot t = k \cdot n \cdot (\alpha \cdot G - \beta / G) ,$$

v nichž jsme zavedli zkratku $G = \exp(n \cdot k \cdot a)$.

Asi nejvhodnějším způsobem řešení těchto rovnic je maticový postup. Zapišme matici soustavy (pořadí proměnných je r, α, β, t)

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 & \cdot & -1 \\ -i & -n & n & 0 & \cdot & -i \\ 0 & G & 1/G & -1 & \cdot & 0 \\ 0 & nG & -n/G & -i & \cdot & 0 \end{pmatrix}$$

a provedme postupně následující operace: i násobek 1. řádku přičteme k 2., $-n$ násobek 3. ke 4., pak 3. řádek vynásobme $(n+i)$ a přičteme k němu G násobek nového 2. řádku, nový 4. řádek pak vynásobme $G \cdot [(n+1)/G + (n-1)G]$ a přičteme k němu $2n$ násobek 3. řádku. Ve 4. řádku dostaneme jediný nenulový prvek v matici soustavy, takže po jednoduché úpravě máme

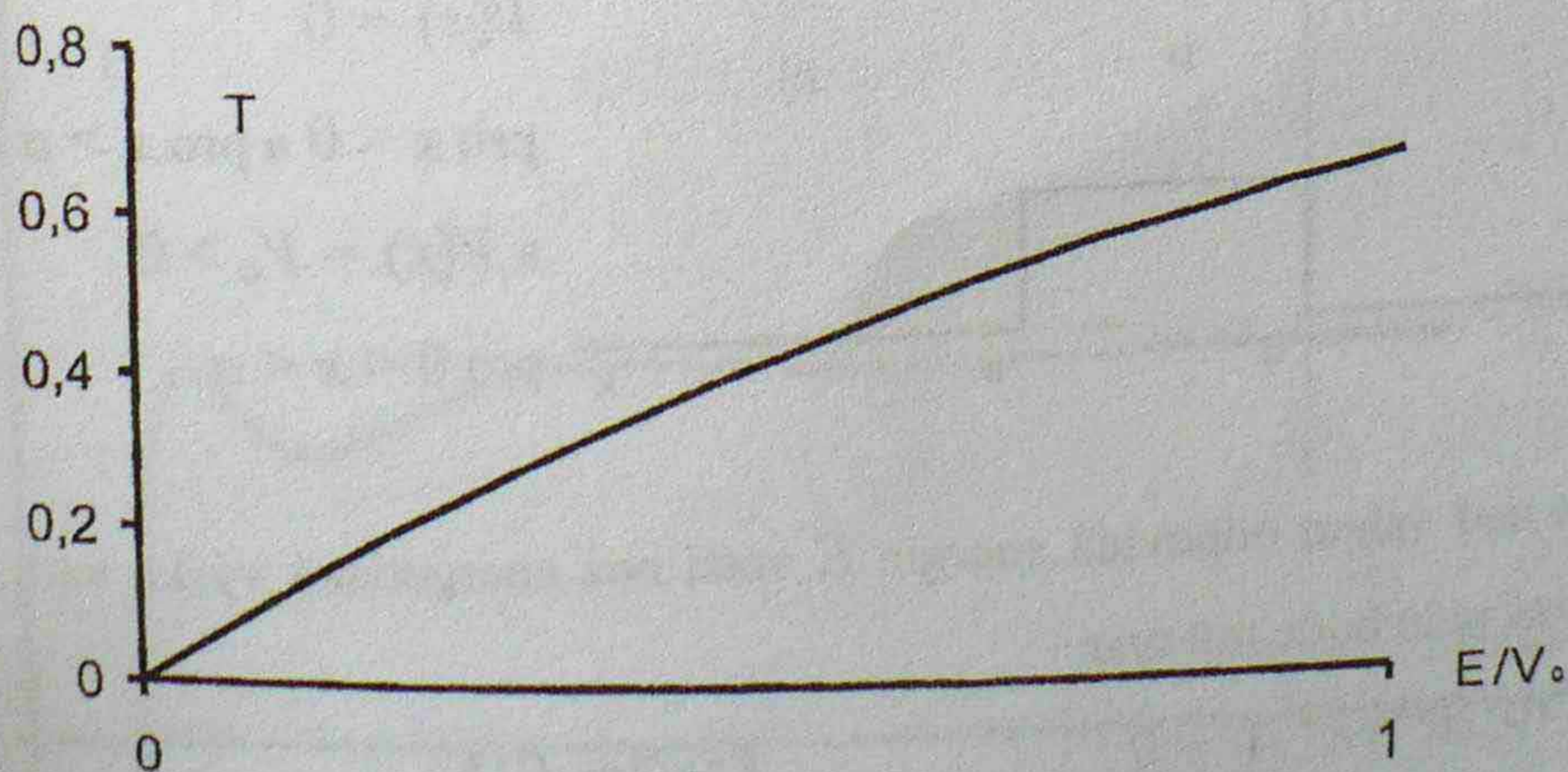
$$t = -4i \cdot n / \left[(n-i)^2 \cdot G - (n+1)^2 / G \right].$$

Uvážíme-li, že $G = \exp(n \cdot k \cdot a)$, lze výraz upravit na tvar

$$t = -2i \cdot n / \left[(n^2 - 1) \sinh(n \cdot k \cdot a) - 2i \cdot n \cdot \cosh(n \cdot k \cdot a) \right].$$

Pravděpodobnost tunelování pak je (použijeme $\cosh^2 = 1 + \sinh^2$)

$$T = |t|^2 = 1 / \left[1 + 1/4 (n + 1/n)^2 \cdot \sinh^2(n \cdot k \cdot a) \right].$$



Val považujeme za "tlustý", když je $n \cdot k \cdot a = a \cdot \sqrt{[2m(V_0 - E)]/\hbar}$ tak veliké, že $\sinh(n \cdot k \cdot a) \approx \frac{1}{2} \exp(n \cdot k \cdot a)$ (stačí, aby $n \cdot k \cdot a > \approx 4$).

Pak lze zanedbat i jednotku ve jmenovateli a psát

$$T \approx 16/[n + 1/n]^2 \cdot \exp\{-2a \cdot \sqrt{[2m \cdot (V_0 - E)]/\hbar}\},$$

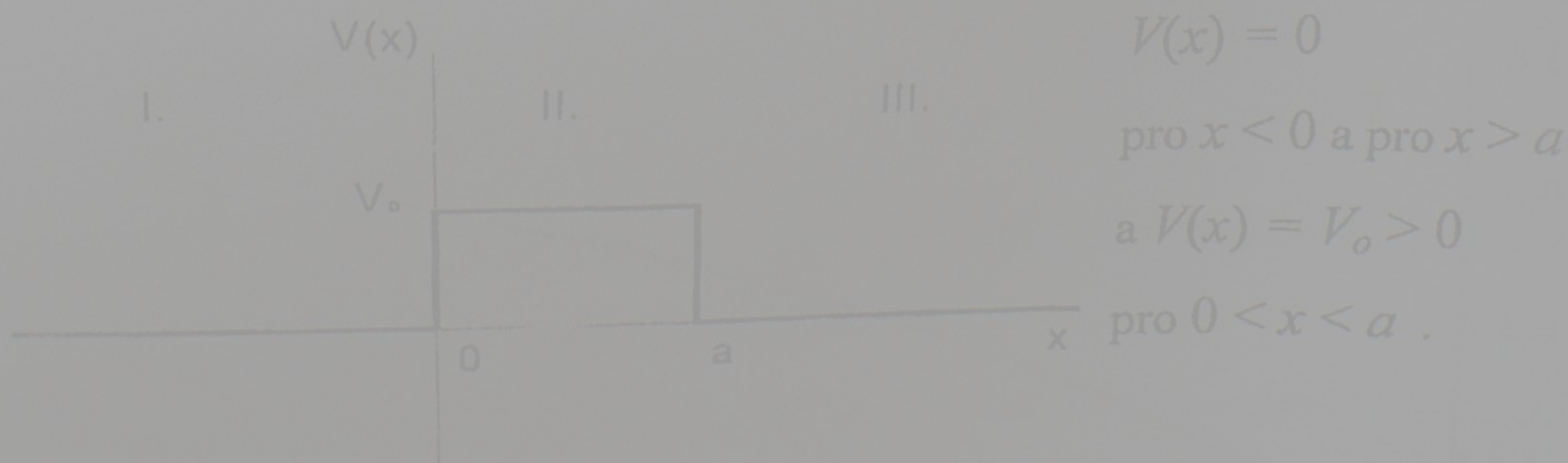
což je přibližný vztah pro "tlustý val".

Pro číselný odhad volme $n = 0.5$, typickou vzdálenost pak 0.3 nm v atomárních systémech a 2 fm v jaderných a typické energie odhadněme jako 3 eV, resp. 50 MeV. Pro pravděpodobnost tunelování pak dostáváme $T \approx 0.01$, resp. $T \approx 0.005$. Pravděpodobnost tunelování tedy není zanedbatelná.

Volíme-li v makroskopickém případě objekt o hmotnosti 1 g, typickou vzdálenost 1 cm a energii 1 J, pak pravděpodobnost tunelování je přibližně $10^{-3.68 \times 10^{30}}$, vskutku zanedbatelná veličina.

30. Spočítejte: pravděpodobnost přechodu nad potenciálovým valem. Pro jaké hodnoty vlnového čísla nedochází k odrazu? Jak se změní výpočet, půjde-li o přechod nad jámou?

Řešení: Potenciální energii volíme ve tvaru



Přechodu nad valem odpovídá energie E větší než energetická výška valu, takže rovnice vně valu bude mít tvar

$$d^2\Phi/dx^2 + k^2 \cdot \Phi = 0$$

$$k^2 = 2m \cdot E/\hbar^2,$$

zatímco uvnitř

$$d^2\Phi/dx^2 + \kappa^2 \cdot \Phi = 0$$

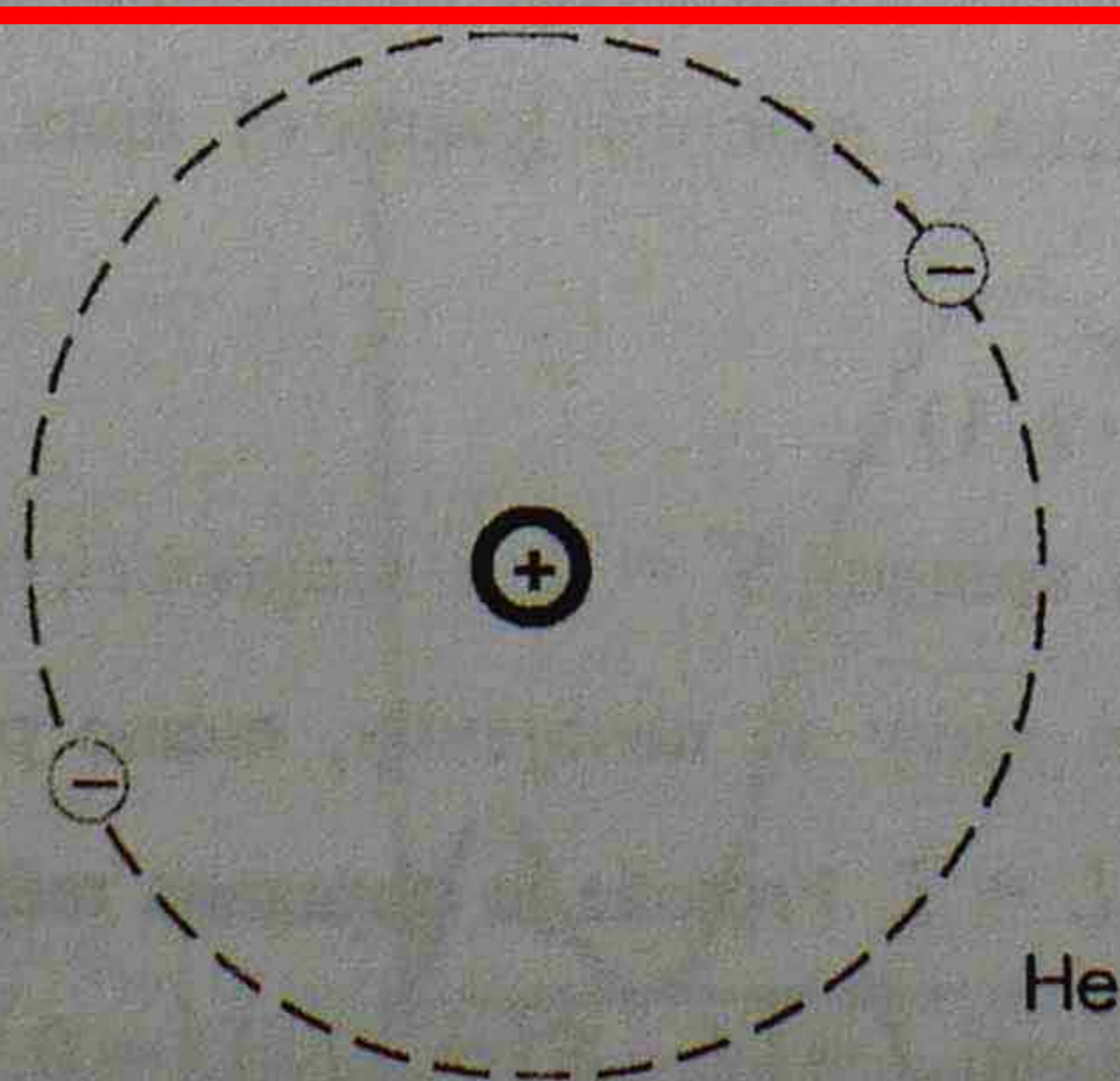
$$\kappa^2 = 2m \cdot (E - V_0)/\hbar^2$$

Obdobně postupujeme u dusíku. Zde budeme vytvářet kombinace tří stavů. Maximální spin dostaneme u kombinace (a, b, c) , která odpovídá kvantovým číslům $(m, s_z) = (0, 3/2)$. Protože takový stav je jediný, je hledaným stavem stav $sS = 3/2$ a $L = 0$. Celkový moment hybnosti nyní odpovídá $J = 3/2$. Základním stavem je tedy $1s^2 2s^2 2p^3 \ ^4S_{3/2}$.

Situaci týkající se kyslíku nemusíme detailněji rozebírat, uvědomíme-li si, že z hlediska výsledného stavu je jedno, zda budeme uvažovat 4 elektrony nebo 2 chybějící místa - díry - v elektronové konfiguraci, a to proto, že celkový spin i orbitální moment jsou v úplně obsazené konfiguraci nulové. Pro 2 místa výsledek již známe, je jím stav 3P . Změní se jen hodnota kvantového čísla odpovídajícího celkovému momentu, nyní je $J = L + S = 1 + 1 = 2$. Základním stavem atomu kyslíku je proto stav $1s^2 2s^2 2p^4 \ ^3P_2$.

Pravidlo o stejném stavu (až na číslo J) základní a doplňkové (děrové) konfigurace ovšem platí obecně.

38. Odhadněte: energii základního stavu helia. Předpokládejte, že elektrony se pohybují po kulové ploše.



Řešení: Energie elektronů v atomu helia je součtem jejich kinetických energií, jež odhadneme pomocí Bohrovy podmínky, potenciálních energií přitahování k jádru a potenciální energie vzájemného odpuzování elektronů. V základním stavu je tato energie minimální.

Protože z $R \cdot m \cdot v = \hbar$ ($n=1$) vyplývá

$\frac{1}{2} m v^2 = \hbar^2 / (2m \cdot R^2)$, máme pro energii

$$E = 2\hbar^2 / (2m \cdot R^2) - 2 \cdot 2e^2 / (4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot R) + e^2 / (4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot R_{12}).$$

Zde jsme střední vzdálenost elektronů označili R_{12} . Protože elektrony se odpuzují, budou se nacházet nejčastěji na opačných stranách jádra, takže položíme $R_{12} \approx 2R$. Přepíšeme-li vyjádření pro energii ve tvaru (doplnění na čtverec)

$$E = \hbar^2/m \left[1/R - \frac{7}{4} m \cdot e^2 / (4\pi \epsilon_0 \hbar^2) \right]^2 - \frac{49}{16} m \cdot e^4 / [(4\pi \epsilon_0)^2 \hbar^2] ,$$

zjistíme, že pro velikost poloměru $R = \frac{4}{7} \cdot 4\pi \epsilon_0 \hbar^2 / (m \cdot e^2) = \frac{4}{7} a_B$ nabývá energie minimální hodnoty $E = -\frac{49}{16} m \cdot e^4 / [(4\pi \epsilon_0)^2 \hbar^2] = -\frac{49}{8} Ry \approx -83 \text{ eV}$.
(Experimentální hodnota je -79 eV .)

39. Odhadněte: pro dvouatomovou molekulu podíl elektronové, vibrační a rotační energie.

Řešení: Energie elektronů v molekule jsou stejně jako v atomech řádově rovny Rydbergově energii $Ry = 13.6 \text{ eV} (= \frac{1}{2} \alpha^2 \cdot m \cdot c^2)$.

Vibrační potenciál má zřejmě v okolí rovnováhy tvar

$$V(\Delta r) = \frac{1}{2} k \cdot \Delta r^2 ,$$

kde Δr je výchylka z rovnováhy. Očekáváme ovšem, že změna vzdálenosti o typickou atomární vzdálenost, totiž Bohrův poloměr $a_B = 1/\alpha \cdot \hbar/mc \approx 53 \text{ pm}$, změni energii molekuly přibližně o typickou atomární energii, totiž Rydbergovu.

Odtud $k = 2Ry/a_B^2 = \alpha^2 \cdot m \cdot c^2 / [\hbar/(\alpha \cdot mc)]^2 = \alpha^4 \cdot m^3 \cdot c^4 / \hbar^2$.

Je-li charakteristická hmotnost molekuly M , pak typická vibrační energie má velikost

$$\hbar \cdot \omega = \hbar \cdot \sqrt{(k/M)} = \alpha^2 \cdot m \cdot c^2 \cdot \sqrt{(m/M)} \approx \sqrt{(m/M)} \cdot Ry .$$

Zjistíme ještě charakteristickou hmotnost molekuly. Zřejmě kinetická energie dvouatomové molekuly činí

$$E_k = 1/2 M_1 \cdot (dr_1/dt)^2 + 1/2 M_2 \cdot (dr_2/dt)^2 ,$$

kde M_1 a M_2 jsou hmotnosti atomů a r_1 a r_2 vzdálenosti od těžiště.

Uvážíme-li, že $r_1 = M_2 / (M_1 + M_2) \cdot r$ a $r_2 = M_1 / (M_1 + M_2) \cdot r$,

kde r je vzájemná vzdálenost atomů a že $dr/dt = d\Delta r/dt$, pak dostaneme

$$E_k = 1/2 M_1 \cdot M_2 / (M_1 + M_2) \cdot (d\Delta r/dt)^2 .$$

Veličina $M = M_1 \cdot M_2 / (M_1 + M_2)$ zvaná redukovaná hmotnost je hledanou charakteristickou hmotností.

Zbývá odhadnout rotační energii. Zřejmě

$$E_{rot} = 1/2 M_1 \cdot r_1^2 \cdot \Omega^2 + 1/2 M_2 \cdot r_2^2 \cdot \Omega^2 ,$$

kde Ω je úhlová rychlost rotace. Dosadíme-li, jako výše, za r_1 a r_2 , dostaneme

$$E_{rot} = 1/2 I \cdot \Omega^2 ,$$

kde $I = M_1 \cdot r_1^2 + M_2 \cdot r_2^2 = M \cdot r^2$ je moment setrvačnosti molekuly. Pro kvantovou teorii je ovšem výhodnější pracovat s momentem hybnosti

$$L = M_1 \cdot r_1^2 \cdot \Omega + M_2 \cdot r_2^2 \cdot \Omega = I \cdot \Omega ,$$

takže $E_{rot} = L^2 / 2I$.

Vlastní hodnoty kvadrátu momentu hybnosti jsou rovny $\hbar^2 \cdot l \cdot (l + 1)$, takže typická rotační energie má hodnotu

$$E_{rot} = \hbar^2 / 2I \approx \hbar^2 / (2M \cdot a_B^2) = \alpha^2 \cdot m^2 c^2 / 2M \approx m/M \cdot Ry ,$$

kde jsme za typickou vzdálenost dosadili Bohrovův poloměr.

Souhrnně tedy dostáváme

$$E_{el} : E_{vibr} : E_{rot} \approx 1 : \sqrt{(m/M)} : m/M$$

Protože redukovaná hmotnost molekuly je obvykle více než $1000 \times$ větší než hmotnost elektronu, jsou vibrační energie malé vůči elektronovým a rotační vůči vibračním. (Při $m/M = 1/1000$ a $E_{el} \approx 10$ eV dostáváme $E_{vibr} \approx 0.3$ eV a $E_{rot} \approx 0.01$ eV.)

Porovnáním obou vztahů dostaneme

$$e = -1/4 \cdot p^2 \cdot (p-1)/(p+3).$$

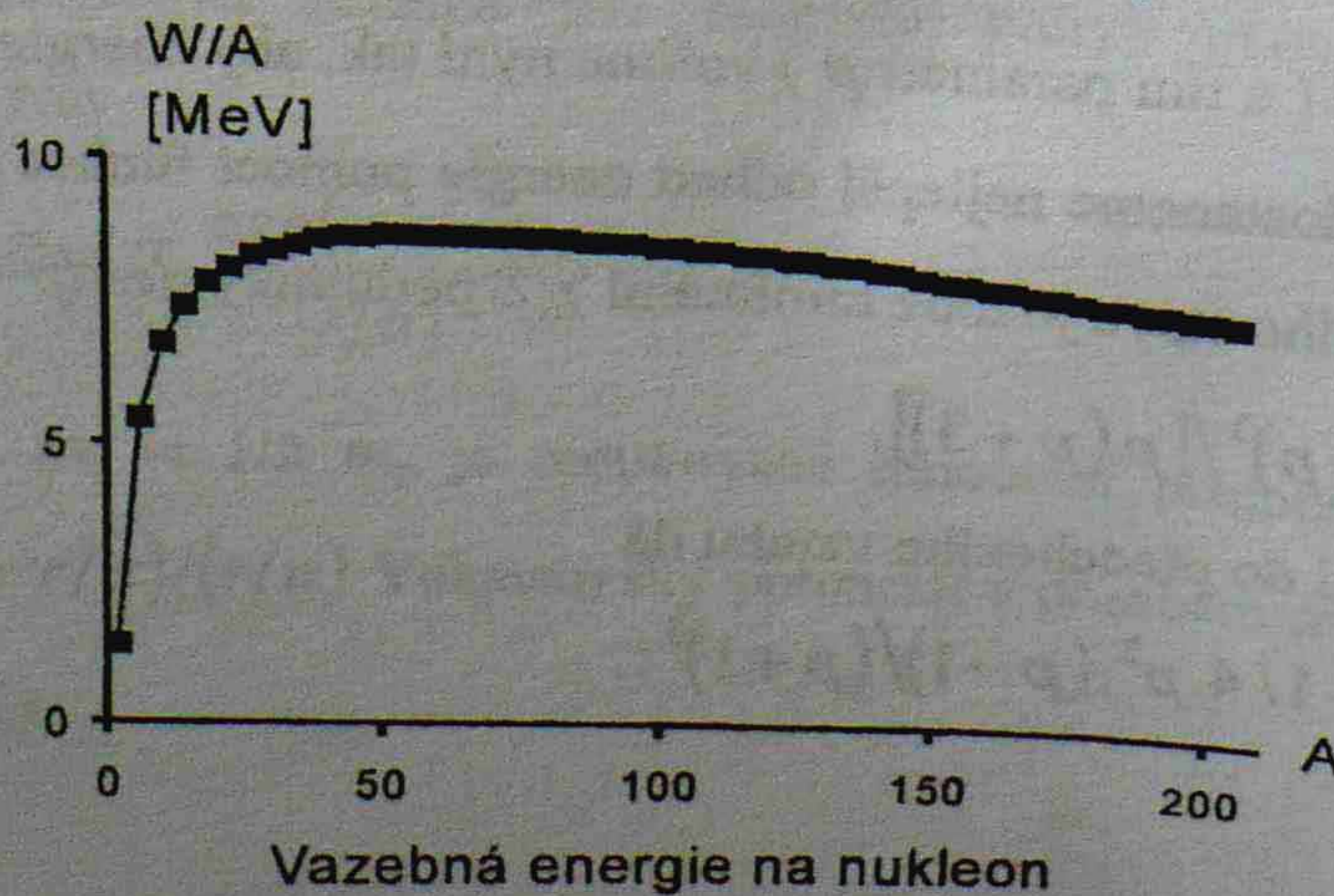
Protože $e = 2m^* \cdot a^2 / \hbar^2 \cdot (-2.23 \times 1.6 \times 10^{-13} \text{ J}) = -0.216$ je záporné a p musí být podle definice kladné, zjišťujeme, že $p > 1$. Protože v této oblasti je pravá strana výrazu pro e klesající, můžeme snadno numericky nalézt odpovídající hodnotu parametru p . Jest $p = 2.04$, odkud $-e/v_0 = 0.0786$, a tedy $V_0 = 28.4 \text{ MeV}$.

Charakteristická vzdálenost nukleonů je ovšem $1/2\alpha$ (rozdělení pravděpodobnosti popisuje funkce $\Phi^* \cdot \Phi$), odkud vyplývá, že poměr $(1/2a)/\alpha = 1/p$ charakterizuje střední vzdálenost nukleonů. Z výsledné hodnoty p vyplývá, že tato střední vzdálenost je rovna přibližně polovině dosahu silné interakce, a tedy rovna asi 1 fm.

3. Najděte: pomocí Weizsäckerovy formule vztah mezi nábojem a hmotností nejstabilnějších jader. Prozkoumejte také β -stabilitu okolních jader.

Potřebná data: Weizsäckerova formule pro hmotnost jader má tvar

$$\begin{aligned} M(A, Z) &\equiv Z \cdot M_p + (A - Z) \cdot M_n - W(A, Z) \\ &= Z \cdot M_p + (A - Z) \cdot M_n - \alpha \cdot A + \beta \cdot A^{2/3} + \gamma \cdot Z^2 \cdot A^{-1/3} \\ &\quad + \sigma \cdot (A/2 - Z)^2 \cdot A^{-1} - [(-1)^Z + (-1)^{(A-Z)}] \delta / 2 \cdot A^{-3/4}, \end{aligned}$$



kde uvedené parametry mají hodnoty $M_p = 938.3$ MeV, $M_n = 939.6$ MeV, $\alpha = 15.8$ MeV, $\beta = 17.8$ MeV, $\gamma = 0.71$ MeV, $\sigma = 94.8$ MeV, $\delta = 34$ MeV.

(V literatuře nacházíme díky různému způsobu "fitování" odlišné hodnoty.)

Řešení: Zanedbáme-li poslední člen rozlišující sudo-sudá, licho-sudá, sudo-lichá a licho-lichá jádra, pak při zadaném hmotnostním čísle A má podmínka pro nejstabilnější izobar tvar

$$0 = \partial M / \partial Z = M_p - M_n + 2\gamma \cdot Z \cdot A^{-1/3} - 2\sigma \cdot (A/2 - Z) \cdot A^{-1}$$

(podmínka minima hmotnosti vzhledem k nábojovému číslu Z).

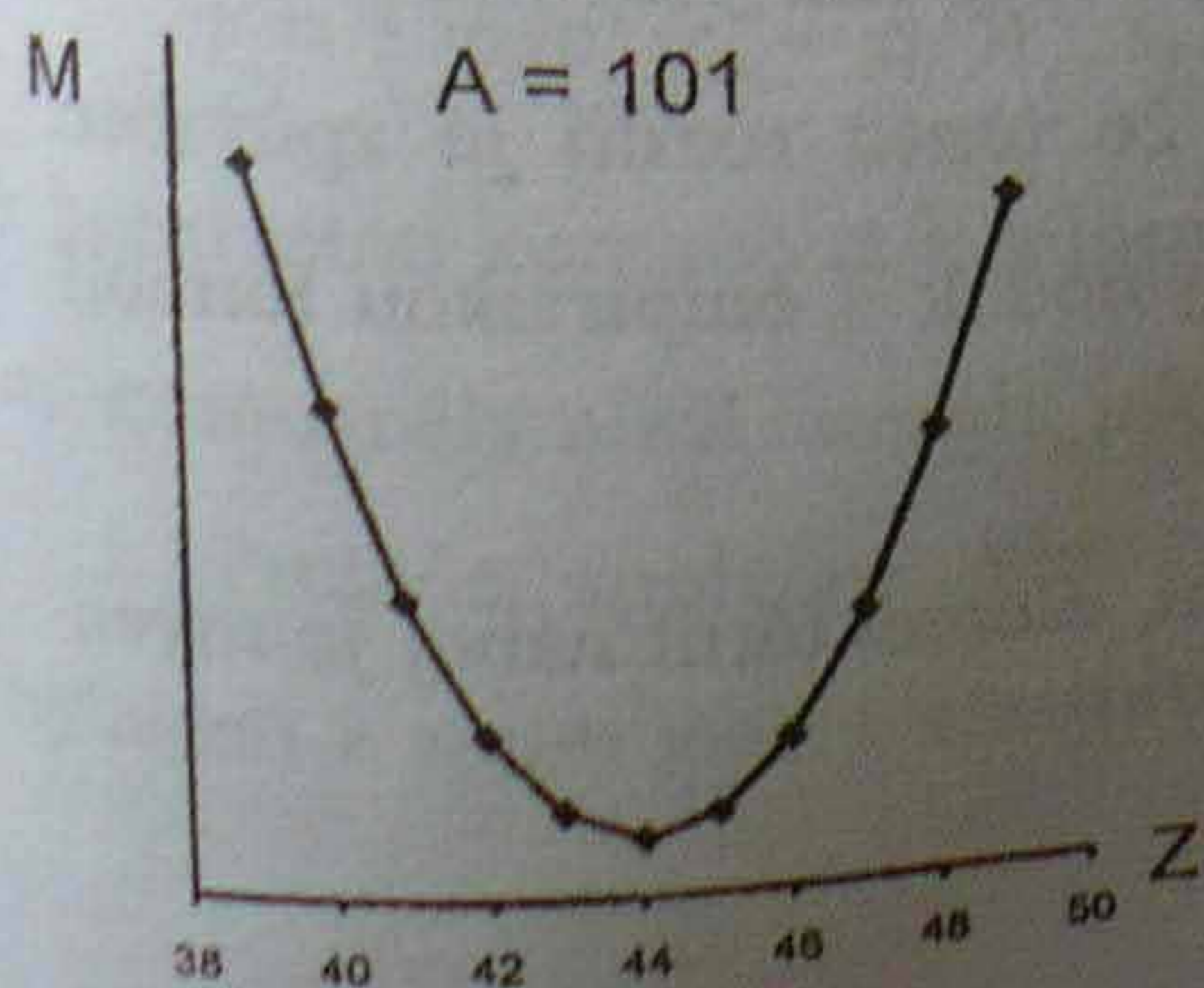
Odtud

$$Z = \frac{A}{2\sigma / (M_n - M_p + \sigma) + 2\gamma / (M_n - M_p + \sigma) \cdot A^{2/3}}$$

$$= \frac{A}{1.97 + 0.015 A^{2/3}},$$

po dosazení číselných hodnot parametrů. Protože nábojové číslo Z je celé, musíme uvažovat nejbližší celé číslo k uvedenému. Z výsledku je patrné, že pro lehká jádra je $Z \approx A/2$, u těžších jader je Z menší (např. pro $A \approx 210$ máme $Z \approx 2/5 A$).

Charakter β -stability lze odhadnout, uvědomíme-li si, že závislost hmotnosti na nábojovém čísle Z je kvadratická (hmotnostní číslo A se při β -rozpadu nemění).



Je-li A liché číslo, pak grafem Weizsäckerovy formule je jediná parabola, přičemž, pokud při Z odpovídajícímu nejstabilnějšímu izobaru platí $M(A, Z-1) > M(A, Z) + m$ (m je hmotnost elektronu), může docházet k β^- -rozpadu. V případě jádra

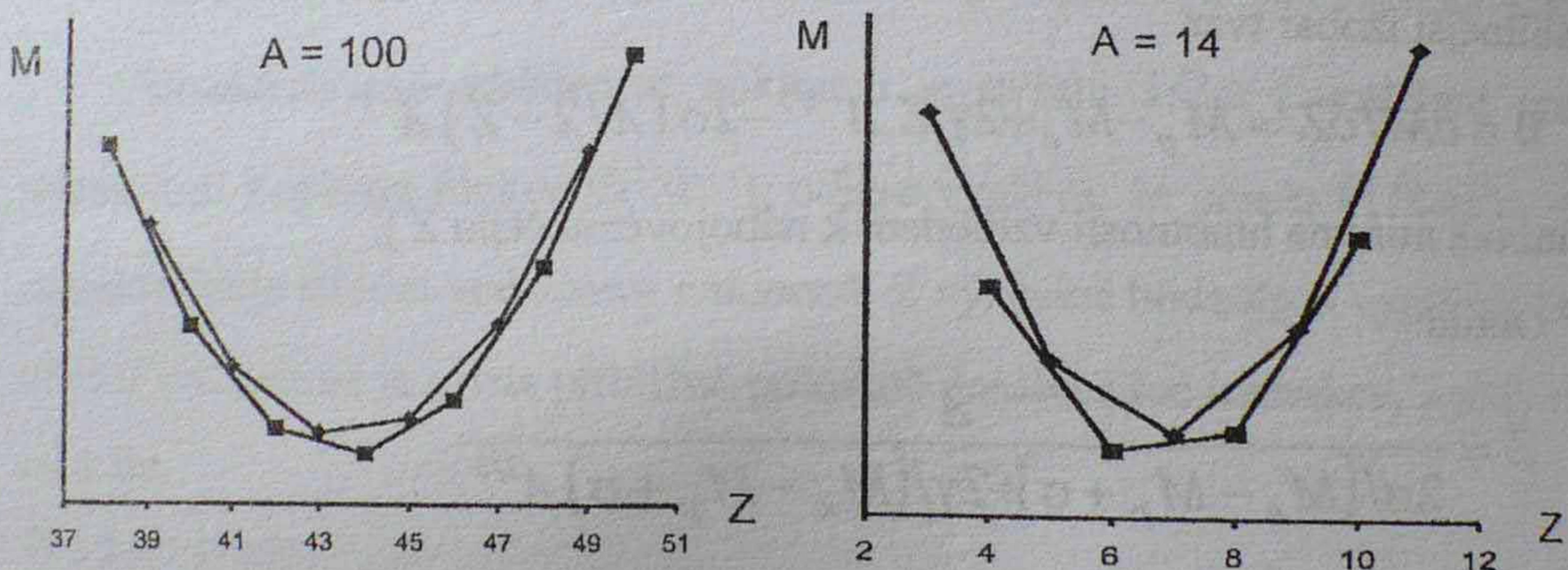
s čísly $A, Z + 1$ pak může, pokud

$$M(A, Z + 1) > M(A, Z) + m,$$

docházet k β^+ -rozpadu a vždy alespoň ke K -záchytu, protože vždy platí

$$M(A, Z + 1) + m > M(A, Z).$$

V případě sudého A jsou díky poslednímu členu grafem formule dvě



paraboly, jedna pro lichá Z a jedna pro sudá. Je-li nábojové číslo nejstabilnějšího izobaru sudé, pak stabilními jsou i izobary s nábojovým číslem $Z \pm 2$, protože potřebný dvojitý β -rozpad je extrémně nepravděpodobný. Pokud nábojové číslo nejstabilnějšího izobaru je liché, pak obvykle existují dva izobary s nábojovými čísly $Z \pm 1$ na něž se licho-lichý izobar rozpadá. Výjimku tvoří 4 nejlehčí licho-liché izobary, pro něž je energie sousedních izobarů vyšší.

4. Rozdíl vazebných energií zrcadlových jader ^{23}Na a ^{23}Mg činí 4,84 MeV.

Najděte: poloměr těchto jader, předpokládáme-li, že tento rozdíl je způsoben elektromagnetickou interakcí. Porovnejte získaný výsledek s empirickou formulí pro poloměr jádra $R = 1,2 A^{1/3}$ fm.

Potřebná data: permitivita vakua činí $8,85 \times 10^{-12}$ F/m, elementární náboj je roven $1,6 \times 10^{-19}$ C.

Řešení: Energie rovnoměrně nabitě kuličky o poloměru R je dána vztahem

$$E = 3/5 \cdot Q^2 / (4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot R)$$

(viz příklad VI.13). Protože jádro sodíku má náboj $11e$ a hořčíku $12e$, kde e je elementární náboj, dostáváme pro rozdíl elektromagnetických vazebných energií

$$\Delta E = (12^2 - 11^2) \cdot 3/5 \cdot e^2 / (4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot R),$$

odkud

$$R = 69/5 \cdot e^2 / (4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot \Delta E),$$

což dá číselně 4.11 fm. Podle empirické formule bychom dostali 3.41 fm.

Získaný asi 20 % nesoulad souvisí se skutečností, že náboj v jádru není zcela rovnoměrně rozložen. Povrchová asi 2 fm tlustá vrstva není u lehkých jader zanedbatelná.

5. Prozkoumejte: charakter energetických hladin (první tři slupky) ve slupkovém modelu jádra pracujícím s přiblížením kulového harmonického oscilátoru a s korekcí, která je úměrná součinu spinového a orbitálního momentu hybnosti.

(V kulových souřadnicích je energie kulového oscilátoru dána vztahem

$$E = (2n_r + l + 3/2) \cdot \hbar\omega, \text{ kde } n_r = 0, 1, \dots \text{ je radiální a } l \text{ orbitální kvantové číslo a}$$

ω frekvence oscilátoru.)

Řešení: Potenciální energie, se kterou pracuje model, má tvar

$$V = \frac{1}{2} m \cdot \omega^2 \cdot r^2 - a/\hbar^2 \cdot \hat{s} \cdot \hat{I},$$

s konstantou korekce a kladnou, aby stavy se spinem antiparalelním orbitálnímu momentu měly nižší energii, jak je tomu ve skutečnosti.

Protože společné vlastní stavy energie kulového oscilátoru, momentu hybnosti a spinu jsou i vlastními stavy spin-orbitální korekce, zbývá jen spočítat

energii odpovídající této korekci. Zavedme proto operátor celkového momentu hybnosti vztahem $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}$. Pak zřejmě

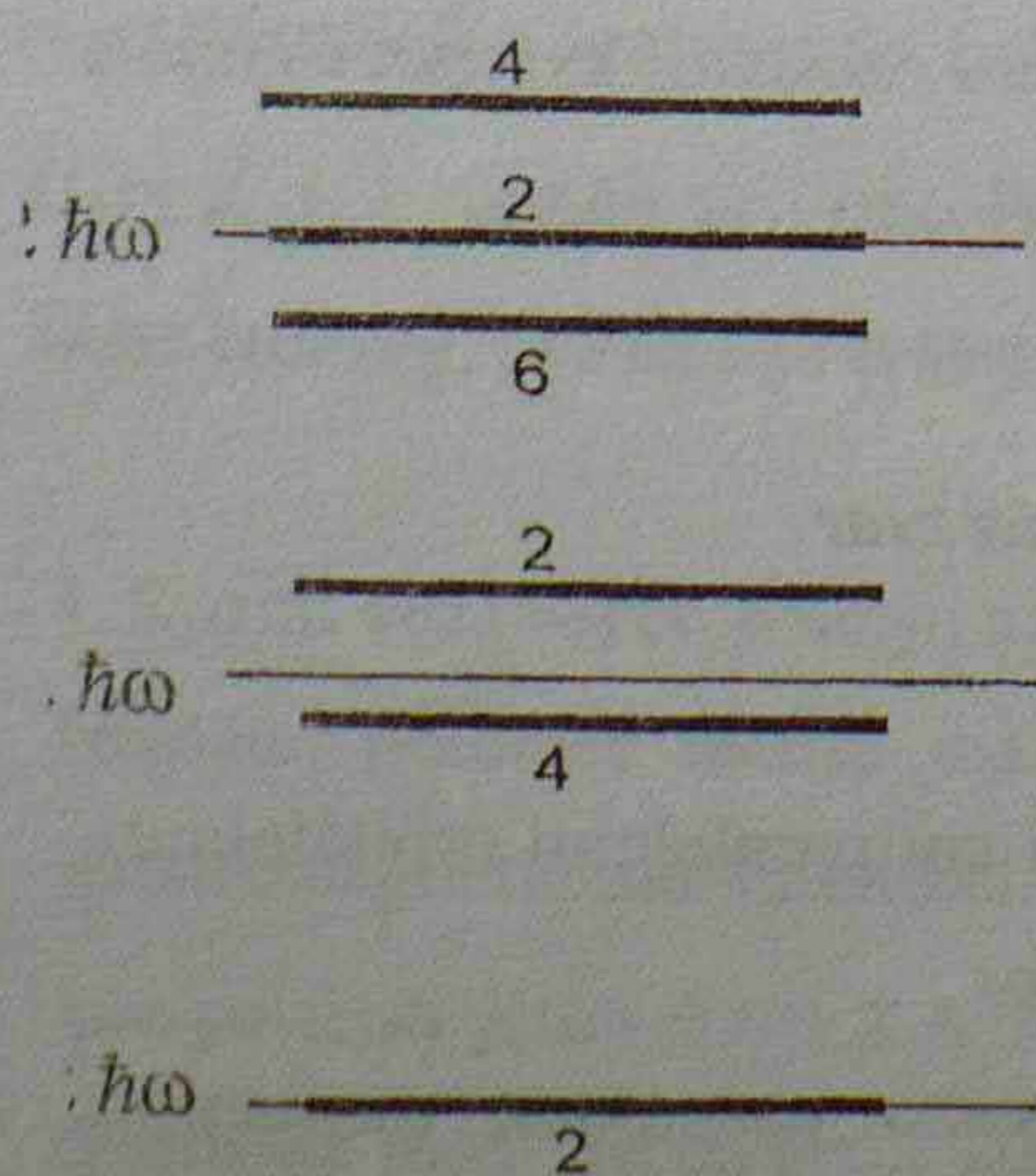
$$\hat{\mathbf{j}}^2 = \hat{\mathbf{l}}^2 + \hat{\mathbf{s}}^2 + 2\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$$

a stav s kvantovými čísly j , l a s (celkový, orbitální a spinový moment hybnosti) splňuje podmínku

$$1/\hbar^2 \cdot \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}} \Phi_{jls} = \frac{1}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \Phi_{jls} .$$

(S vlastními hodnotami tvaru $x(x+1)$ jsme se již setkali u orbitálního momentu hybnosti. Stejný tvar vlastních hodnot se objevuje i u spinového i u celkového momentu hybnosti.)

Uvažíme-li, že v našem případě $s = 1/2$ a $j = l \pm 1/2$ pro spin paralelní, resp. antiparalelní orbitálnímu momentu, dostáváme korekci rovnou $-1/2 a l$ pro stav s orbitálním číslem l a paralelním spinem a rovnou $+1/2 a (l+1)$ pro spin antiparalelní. (V případě, kdy $l = 0$ se uplatní pouze první vztah.) Počet možných stavů daného typu je dán možnými orientacemi celkového momentu hybnosti, kterých je $2j + 1$.



Jednoduché dosazování vede k následujícím závěrům : první slupce, s nekorigovanou energií rovnou $3/2 \hbar\omega$, odpovídá pouze stav $0s_{1/2}$ (v označení $n_r l_j$), korekce k této energii je nulová a tato slupka je obsaditelná 2×2 nukleony (dodatečná dvojka odpovídá dvěma druhům nukleonů - protonům a neutronům); druhé slupce s nekorigovanou energií $5/2 \hbar\omega$ odpovídají stavy $0p_{3/2}$ a $0p_{1/2}$ s energií $5/2 \hbar\omega - 1/2 a$, respective

$5/2 \hbar\omega + a$ obsaditelné 2×4 resp. 2×2 nukleony a třetí slupce s nekorigovanou

energií $7/2 \hbar\omega$ stavy $0d_{5/2}$, $1s_{1/2}$ a $0d_{3/2}$ s energiemi $7/2 \hbar\omega - a$, $7/2 \hbar\omega$ a $7/2 \hbar\omega + 3/2 a$, s možným obsazením 2×6 , 2×2 , resp. 2×4 nukleony.

Získaný počet hladin souhlasí s počtem nukleonů v magických jádrech. Slupky jsou výrazné, pokud a je dosti menší než $\hbar\omega$.

Významným jaderným procesem je radioaktivní rozpad.

6. Zformulujte : rozpadový zákon na základě předpokladu, že pravděpodobnost rozpadu částice za jednotku času je konstantní. Najděte souvislost této tzv. rozpadové konstanty s poločasem rozpadu a střední dobou života částice.

Řešení : Označme počet částic, které "přežily" do okamžiku t jako $P(t)$. Pak počet částic přeživších do okamžiku $t + dt$ je zřejmě

$$P(t + dt) = P(t) \cdot (1 - \lambda dt),$$

protože pravděpodobnost rozpadu částice za čas dt je podle předpokladu λdt (s konstantou úměrnosti λ) a pravděpodobnost nerozpadnutí tedy $(1 - \lambda dt)$. Odtud snadno

$$dP(t)/dt = -\lambda P(t)$$

a po integraci

$$P(t) = P(0) \cdot \exp(-\lambda t),$$

kde $P(0)$ je počáteční počet částic. Jejich počet tedy klesá exponenciálně.

Poločas rozpadu zjistíme ze vztahu

$$P(T_{1/2}) = \frac{1}{2} P(0) = P(0) \cdot \exp(-\lambda T_{1/2}),$$

odkud

$$\ln \frac{1}{2} = -\ln 2 \approx -0.693 = -\lambda T_{1/2},$$

takže $T_{1/2} = 0.693/\lambda$ nezávisle na počátečním množství, tj. i na počátečním okamžiku.

Počet částic právě doživších dobu t až $t + dt$ je $P(t) \cdot \lambda dt$, takže střední doba života částice τ je

$$\tau = \int t \cdot P(t) \cdot \lambda dt = \int t \cdot \exp(-\lambda t) \cdot \lambda dt = 1/\lambda,$$

protože v případě jedné částice je $P(0) = 1$ a příslušný výpočet provedeme snadno metodou per partes. Střední doba života je tedy rovna převrácené hodnotě rozpadové konstanty.

Porovnáním s předchozím vztahem ještě dostaneme

$$T_{1/2} = \tau \ln 2 = 0.693 \tau,$$

poločas rozpadu odpovídá přibližně 70 % doby života.

7. V tzv. sekulární rovnováze s 1 g ^{226}Ra je pouhých 6.5 μg ^{222}Rn .

Najděte: poločasy rozpadu rádia a radonu.

Potřebný údaj: aktivita 1 g rádia, tzv. 1 Ci = 37 GBq (Ci = curie, Bq = bequerel = 1 rozpad/s), Avogadrovo číslo je rovno $6 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$.

Řešení: V úloze se jedná o dva radioaktivní preparáty následující za sebou v rozpadové řadě.

Pro první preparát zřejmě platí

$$dn_1/dt = -\lambda_1 \cdot n_1,$$

kde n_1 je počet jader tohoto preparátu a λ_1 jeho rozpadová konstanta.

Pro druhý preparát platí

$$dn_2/dt = \lambda_1 \cdot n_1 - \lambda_2 \cdot n_2,$$

protože kromě toho, že se druhý preparát rozpadá s rozpadovou konstantou λ_2 , dochází také k jeho přibývání díky rozpadům "mateřských" jader rádia.

Řešení obou rovnic má tvar

$$n_1 = n_{10} \cdot \exp(-\lambda_1 \cdot t)$$

$$n_2 = n_{20} \cdot \exp(-\lambda_2 \cdot t) + n_{10} \cdot \lambda_1 / (\lambda_2 - \lambda_1) [\exp(-\lambda_1 \cdot t) - \exp(-\lambda_2 \cdot t)],$$

kde n_{10} a n_{20} jsou integrační konstanty. (První rovnice se integruje přímočaře. První a třetí člen v řešení druhé rovnice představují řešení rovnice bez pravé strany a druhý člen je partikulárním řešením pro pravou stranu, kterou dostaneme dosazením za n_1 .)

Podíl počtu jader je

$$n_2/n_1 = n_{20}/n_{10} \cdot \exp[(\lambda_1 - \lambda_2)t] + \lambda_1/(\lambda_2 - \lambda_1) \{1 - \exp[(\lambda_1 - \lambda_2)t]\} .$$

Pravá strana je pak velice přibližně konstantní, pokud je výraz $\exp[(\lambda_1 - \lambda_2)t]$ dostatečně malý, tj. pokud $\lambda_1 < \lambda_2$ a uplynula dostatečně dlouhá doba od počátečního okamžiku. Pak

$$n_2/n_1 \approx \lambda_1/(\lambda_2 - \lambda_1) .$$

V našem případě očekáváme dokonce, že $\lambda_2 \gg \lambda_1$, protože aktivita radonu je zjevně značně vyšší než aktivita rádia. Podmínku rovnováhy v tomto případě můžeme ještě zjednodušit na tvar

$$\lambda_1 \cdot n_1 \approx \lambda_2 \cdot n_2 .$$

Doba potřebná k nastavení této sekulární rovnováhy je zřejmě rovna několikanásobku doby rozpadu (resp. poločasu) radonu.

Protože 1 g rádia obsahuje $n_1 = N_A/A_{\text{Ra}}$ jader (N_A je Avogadrovo číslo a A_{Ra} atomární hmotnost) a jeho aktivita daná vztahem $\lambda_1 \cdot n_1 = \lambda_1 \cdot N_A/A_{\text{Ra}}$ je rovna 37 GBq, dostáváme $\lambda_1 = 1.39 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$ a pro poločas rozpadu rádia pak

$$T_{1/2}(\text{Ra}) = \ln 2/\lambda_1 = 5.0 \times 10^{10} \text{ s} \approx 1590 \text{ let} .$$

Obdobný výpočet dává pro radon $\lambda_2 = 2.04 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ a $T_{1/2}(\text{Rn}) = 3.4 \times 10^5 \text{ s} = 3.9 \text{ dne}$.

(Získané hodnoty souhlasí s tabulkovými hodnotami.)

Významným jaderným procesem, který má i důležité praktické využití, je štěpení těžkých jader neutrony.

13. Najděte: pomocí Weizsäckerovy formule (se zanedbaným δ -členem) energetickou podmínku pro dělení jader. Užijte empirický výsledek, že hmotnosti fragmentů bývají přibližně v poměru 2:3.

Potřebná data: Weizsäckerova formule pro vazebnou energii jader se zanedbaným δ -členem má tvar :

$$W(A, Z) = \alpha \cdot A - \beta \cdot A^{2/3} - \gamma \cdot Z^2 \cdot A^{-1/3} - \sigma \cdot (A/2 - Z)^2 \cdot A^{-1} ,$$

kde uvedené parametry mají hodnoty $\alpha = 15.8$ MeV, $\beta = 17.8$ MeV, $\gamma = 0.71$ MeV, $\sigma = 94.8$ MeV .

Řešení: Hmotnost $M(A, Z)$ jádra s hmotnostním číslem A a nábojovým číslem Z souvisí s vazebnou energií tohoto jádra vztahem

$$M(A, Z) = Z \cdot M_p + (A - Z) \cdot M_n - W(A, Z) ,$$

kde M_p , M_n jsou hmotnosti protonu a neutronu. Podmínka jeho energetické stability vůči rozpadu na dceřiná jádra s hmotnostními čísly A_1 , resp. A_2 a nábojovými čísly Z_1 , resp. Z_2 má tvar

$$M(A, Z) > M(A_1, Z_1) + M(A_2, Z_2) ,$$

což, uvážíme-li, že $A = A_1 + A_2$ a $Z = Z_1 + Z_2$, můžeme přepsat ve tvaru

$$W = W(A_1, Z_1) + W(A_2, Z_2) - W(A, Z) > 0 ,$$

neboli po dosazení

$$\begin{aligned} W = & \alpha \cdot A_1 - \beta \cdot A_1^{2/3} - \gamma \cdot Z_1^2 \cdot A_1^{-1/3} - \sigma \cdot (A_1/2 - Z_1)^2 \cdot A_1^{-1} \\ & + \alpha \cdot A_2 - \beta \cdot A_2^{2/3} - \gamma \cdot Z_2^2 \cdot A_2^{-1/3} - \sigma \cdot (A_2/2 - Z_2)^2 \cdot A_2^{-1} \\ & - \alpha \cdot A + \beta \cdot A^{2/3} + \gamma \cdot Z^2 \cdot A^{-1/3} + \sigma \cdot (A/2 - Z)^2 \cdot A^{-1} \end{aligned}$$

$$= \beta \cdot (A^{2/3} - A_1^{2/3} - A_2^{2/3}) + \gamma \cdot (Z^2 \cdot A^{-1/3} - Z_1^2 \cdot A_1^{-1/3} - Z_2^2 \cdot A_2^{-1/3}) \\ + \sigma \cdot \left[(A/2 - Z)^2 \cdot A^{-1} - (A_1/2 - Z_1)^2 \cdot A_1^{-1} - (A_2/2 - Z_2)^2 \cdot A_2^{-1} \right] > 0 ,$$

kde jsme využili vztahy mezi hmotnostními a nábojovými čísly. Použijeme-li ještě vztahů $A_1 = 2/5 A$, $A_2 = 3/5 A$, $Z_1 = 2/5 Z$ a $Z_2 = 3/5 Z$, dostaneme

$$W = \beta \cdot A^{2/3} \cdot \left[1 - (2/5)^{2/3} - (3/5)^{2/3} \right] + \gamma \cdot Z^2 \cdot A^{-1/3} \cdot \left[1 - (2/5)^{5/3} - (3/5)^{5/3} \right] \\ = 0.36 \gamma \cdot Z^2 \cdot A^{-1/3} - 0.25 \beta \cdot A^{2/3} > 0 .$$

Tuto podmínku lze přepsat po dosazení za β a γ ve tvaru

$$Z^2/A > 0.25/0.36 \cdot \beta / \gamma = 17 .$$

Porovnáním s tabulkou nuklidů bychom zjistili, že tato podmínka je splněna počínaje $Z = 40$ (Zr). Bližší rozbor by ale ukázal, že dělení brání energetický val, takže takový proces má exponenciálně malou pravděpodobnost a je pozorován až u transuranových jader.

14. Při rozpadu jednoho jádra ^{235}U se uvolňuje přibližně 200 MeV energie.

Spočtete: kolik energie se uvolní z 1 kg ^{235}U , jaké množství tohoto uranu spotřebuje za 1 rok jaderná elektrárna o výkonu 1000 MW při účinnosti 30 % a jaké množství nafty o výhřevnosti 400 MJ/kg bychom při 100 % účinnosti potřebovali na naftovou elektrárnu téhož výkonu. Spočtete také, jaké množství ^{235}U potřebujeme k výrobě jaderné pumpy o ekvivalentu 0.5 Mt TNT.

Potřebná data: Avogadrovo číslo je rovno $6 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$, elementární náboj je roven $1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$, 1 t TNT odpovídá 4 GJ.

Řešení: Jeden kg uranu obsahuje N_A/A_U jader, kde N_A je Avogadrovo číslo a A_U je molární hmotnost uranu ($= 235 \text{ g/mol}$). Energie uvolněná z 1 kg uranu je tedy

$$E_1 = N_A/A_U \cdot 200 \text{ MeV} = 8.2 \times 10^{13} \text{ J} .$$

Energie, kterou vyrobí 1000 MW elektrárna za 1 rok obnáší

$$E_r = 365.25 \times 86400 \times 1000 \times 10^6 \text{ J} \approx 3.2 \times 10^{16} \text{ J},$$

na co se spotřebuje

$$m = E_r / (\eta \cdot E_1) \approx 1300 \text{ kg uranu.}$$

($\eta = 0.30$ je účinnost elektrárny)

Energie uvolňující se z nafty je asi dvěstětisíckrát menší, vzhledem k předpokládané asi třikrát větší účinnosti potřebujeme pouze asi šedesátisíckrát více nafty tj. asi 78 000 tun.

Podle uvedených údajů uvolňuje 1 půlmegatonová puma energii $E' = 2 \times 10^{15} \text{ J}$ a na její výrobu je tedy třeba $E'/E_1 = 25 \text{ kg } ^{235}\text{U}$.

15. Najděte: střední počet srážek potřebných pro zpomalení neutronů v moderátoru s nepohyblivými jádry.

Řešení: Nechť počáteční energie neutronů činí T_0 a odpovídající rychlost je v_0 . Pro první srážku v moderátoru tvořeném jádry s hmotnostním číslem A zřejmě platí (zákon zachování hybnosti a energie)

$$v_0 = v_1 + A \cdot V \quad \text{a} \quad 1/2 v_0^2 = 1/2 v_1^2 + 1/2 A \cdot V^2,$$

kde v_1 a V jsou rychlosti neutronu a jádra moderátoru po srážce a hmotnosti jsou vyjádřeny v atomových jednotkách. Dosadíme-li za V z první rovnice do druhé, dostaneme

$$v_0^2 = v_1^2 + A \cdot [(v_0 - v_1)/A]^2$$

odkud po úpravě

$$A \cdot (v_0^2 - v_1^2) = (v_0 - v_1)^2$$

a tedy

$$v_1 = -v_0 \cdot (A-1)/(A+1) .$$

Podíl energie po první srážce k počáteční energii je zřejmě

$$T_1/T_0 = v_1^2/v_0^2 = [(A-1)/(A+1)]^2$$

Obdobné formule platí ovšem i pro další srážky, takže

$$T_n/T_0 = [(A-1)/(A+1)]^{2n}$$

Má-li výsledná energie být T , pak potřebný počet srážek je zřejmě

$$n = 1/2 \ln(T_0/T) / \ln((A+1)/(A-1))$$

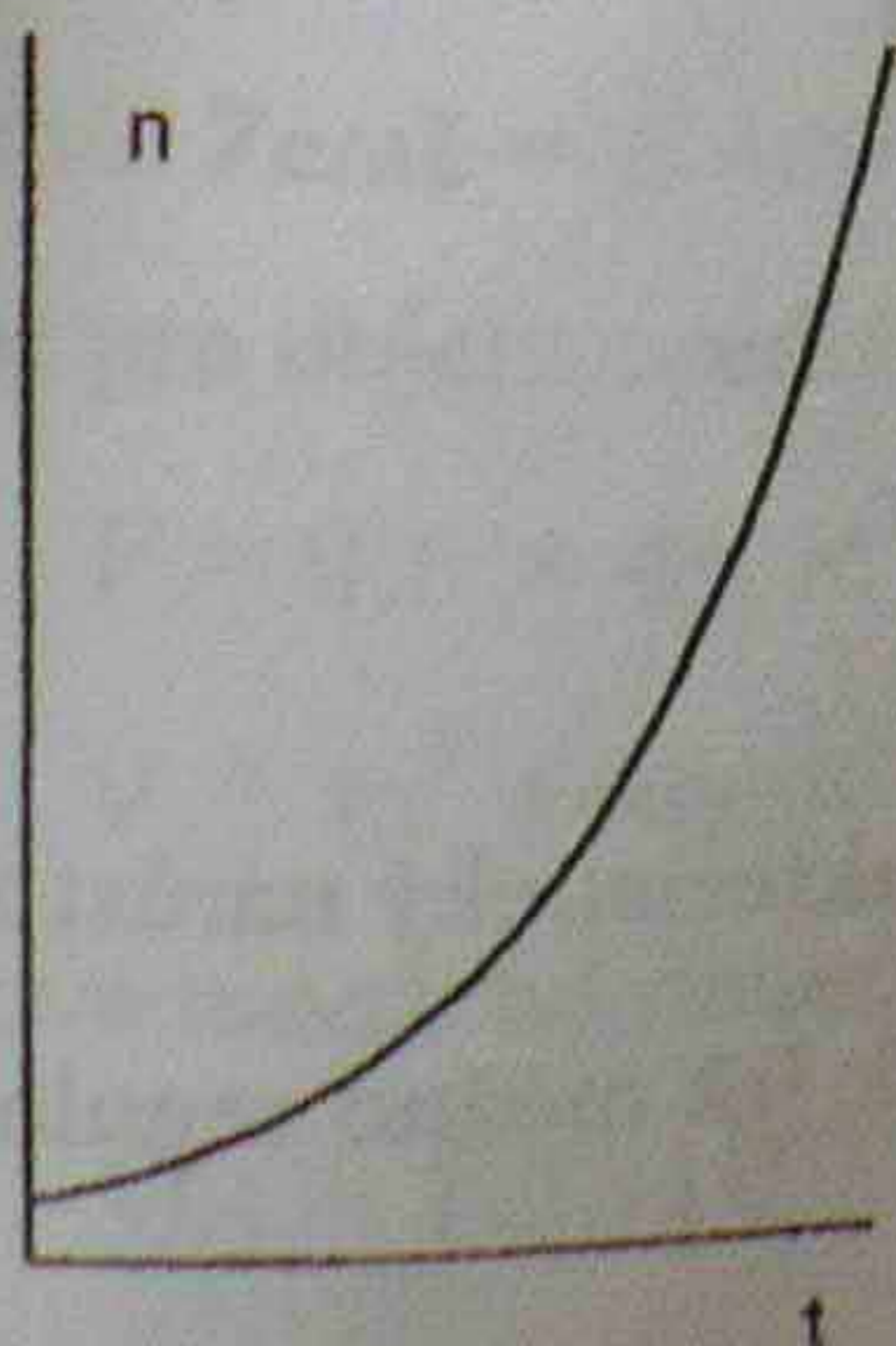
(Při výpočtu počtu potřebných srážek jsme uvážili, že $T < T_0$.)

Přesnější teorie zahrnující vliv pohybu jader moderátoru dává složitější výraz. Ale i z odvozeného výrazu je vidět, že pro zpomalování jsou nejvhodnější lehká jádra, a to proto, že výraz $(A+1)/(A-1)$ je klesající funkcí A .

16. Určete: k jakému zmnožení počtu neutronů dojde v řetězové reakci za 1 s, je-li koeficient zmnožení roven 1.005 a doba života jedné generace neutronů činí asi 10^{-14} s ? Jak se situace změní, započteme-li, že asi 0.6 % neutronů, tzv. zpožděných (uvolňují se se zpožděním z fragmentů), má dobu života asi 10 s ?

Řešení: Bez započtení zpožděných neutronů je počet neutronů, které přibudou za dobu dt , dán vztahem

$$dn = (K - 1) \cdot n \cdot dt / \tau,$$



kde K je koeficient zmnožení a τ doba života jedné generace neutronů. Odtud

$$n = n_0 \cdot \exp[(K - 1) \cdot t / \tau],$$

což pro 1 s dá zmnožení $e^{50} \approx 5.2 \times 10^{21}$. Zjevně dojde k výbuchu.

Při započtení zpožděných neutronů musíme psát rovnice dvě

$$dn/dt = [K.(1 - \beta) - 1]/\tau .n + n_z/\tau_z \quad \text{a}$$

$$dn_z/dt = \beta .K/\tau .n - n_z/\tau_z ,$$

neboť neutrony se rozmnožují přímo a přes fragmenty (o počtu n_z). Parametr β charakterizuje podíl zpožděných neutronů ($= 0.006$) a τ_z je doba života zpožděných neutronů.

Řešení rovnic hledáme, jako obvykle, ve tvaru

$$n = A.exp(\alpha.t) \quad , \quad n_z = B.exp(\alpha.t) ,$$

což vede na podmínky

$$\alpha.A = [K.(1 - \beta) - 1]/\tau .A + 1/\tau_z .B$$

$$\alpha.B = K.\beta/\tau .A - 1/\tau_z .B \quad .$$

Nenulové řešení získáváme jen tehdy, je-li determinant soustavy nulový, tj. když

$$\alpha^2 - \{ [K.(1 - \beta) - 1]/\tau + 1/\tau_z \} .\alpha - 1/\tau_z .(K - 1)/\tau = 0 \quad .$$

Kdyby bylo $K < 1$, pak koeficient u α je záporný a absolutní člen kladný, což znamená, že obě řešení jsou záporná a k rozmnožení neutronů nedochází. V našem případě je $K = 1 + \kappa$, kde κ je malé, ale větší než β . Vzhledem k tomu, že doba života zpožděných neutronů τ_z je značně dlouhá, lze v lineárním členu zanedbat $1/\tau_z$ vůči $[K.(1 - \beta) - 1]/\tau \approx (\kappa - \beta)/\tau$. Je tedy přibližně

$$\alpha_{1,2} = -(\beta - \kappa)/2\tau \pm \sqrt{\{ [(\beta - \kappa)/2\tau]^2 + \kappa/(\tau.\tau_z) \}}$$

V tomto přiblížení

$$\alpha_1 \approx \kappa/[(\beta - \kappa).\tau_z] \approx 0.5 \quad ,$$

$$\alpha_2 \approx -(\beta - \kappa)/\tau - \kappa/[(\beta - \kappa).\tau_z] \approx -10.5 \quad .$$

Nárůst je dán řešením s kladným exponentem. Charakteristický nárůst za 1 s při tom činí přibližně $e^{0.5} \approx 1.63$. Takovéto změny je pak již možno regulovat a řízená řetězová reakce je tedy možná.

Nadějí pro budoucnost je slučování lehkých jader.

17. Vypočtete: jaká energie se uvolní při sloučení 1 kg deuteria, na jak dlouho nám stačí zásoby deuteria v mořské vodě při současné spotřebě a účinnosti jejího využití 1 % (odhadněte obě veličiny).

Potřebná data : Vazebná energie deuteria činí 2.22 MeV, vazebná energie helia 28.3 MeV. Relativní zastoupení deuteria ve vodíku činí 150 ppm (miliontin). Avogadrovo číslo má hodnotu $6 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$, elementární náboj je $1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$.

Řešení: Jestliže se veškeré deuterium přemění na helium, pak uvolněná energie při jednom sloučení bude $28.3 - 2 \times 2.22 \approx 23.9 \text{ MeV}$. Protože 1 kg deuteria obsahuje $1000 N_A / A_D = 500 N_A$ jader deuteria ($A_D = 2$ je hmotnostní číslo deuteria) a na jednu reakci potřebujeme dvě jádra, je energie z 1 kg dána vztahem

$$E_1 = 500 N_A / A_D \times 23.9 \text{ MeV} = 2.4 \times 10^{14} \text{ J} ,$$

asi $3 \times$ více než z ^{235}U .

Současnou spotřebu odhadněme pomocí spotřebovaného výkonu na osobu, který činí přibližně 2 kW. Celková roční spotřeba proto činí

$$E_{\text{rok}} = 6 \times 10^9 \times 2 \times 10^3 \times 3.15 \times 10^7 = 3.8 \times 10^{20} \text{ J} ,$$

neboť počet obyvatel Země se pohybuje kolem 6 miliard a rok má přibližně 3.15×10^7 sekund.

Objem oceánů odhadneme z jejich plochy, která činí asi $0.6 \times 4\pi.R^2$, kde R je poloměr Země = 6 400 km, a z jejich střední hloubky, která činí asi 3 km. Odtud máme pro objem oceánu

$$V = 0.6 \times 4\pi.R^2 \times 3 \times 10^3 = 10^{18} \text{ m}^3 .$$

V 1 m^3 vody je ovšem jen $2A_H / (2A_H + A_O) \times 10^3 \text{ kg}$ vodíku a tedy celkové množství deuteria v oceánech činí

$$M_D = 1.5 \times 10^{-4} \times 1/9 \times 10^3 \times 10^{18} = 1.7 \times 10^{16} \text{ kg} ,$$

což dává pro energii z deuteria

$$E_D = \eta \cdot M_D \cdot E_1 = 10^{-2} \times 1.7 \times 10^{16} \times 2.4 \times 10^{14} = 4.1 \times 10^{28} \text{ J} ,$$

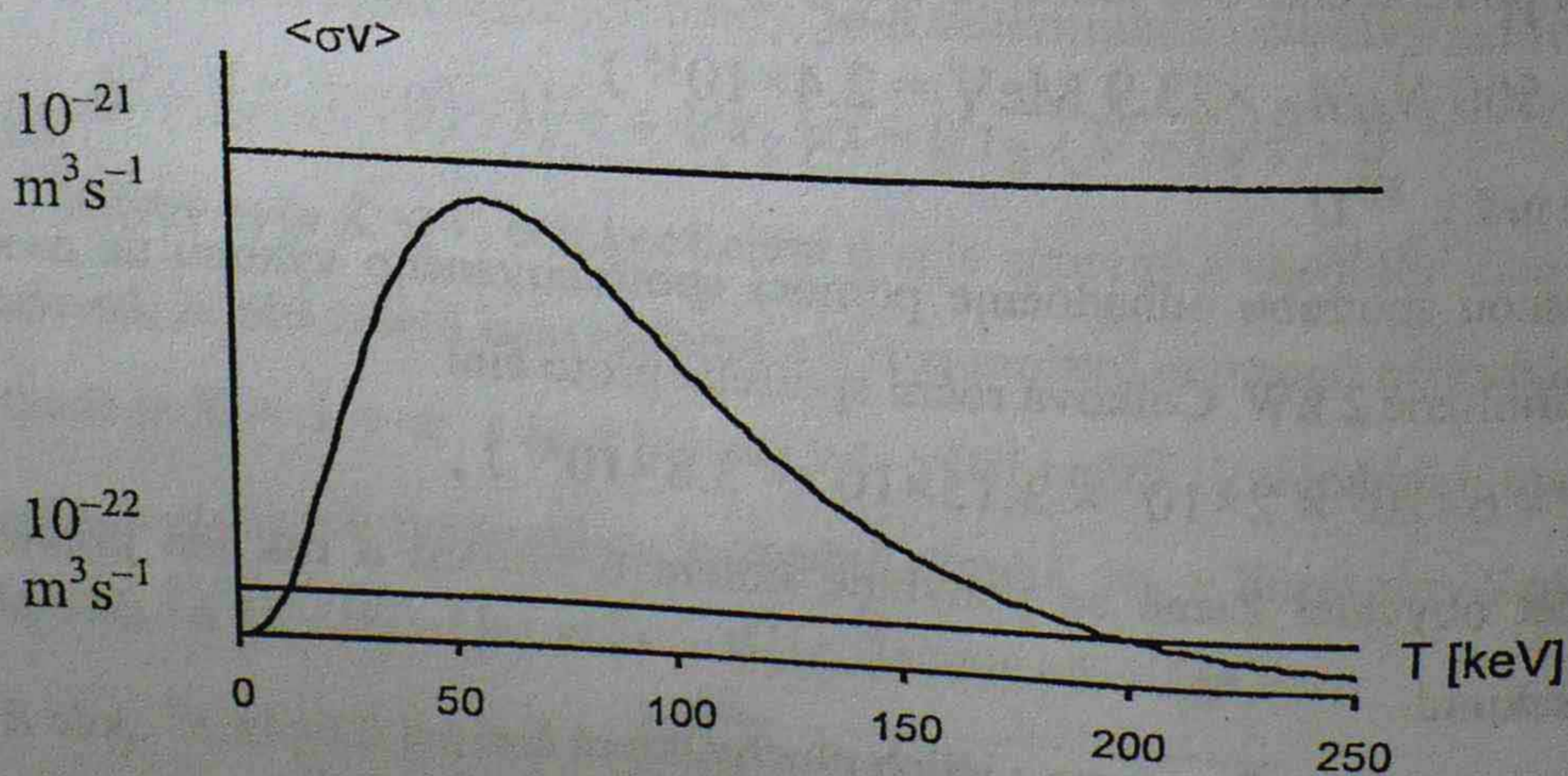
která vystačí přibližně na

$$E_D / E_{\text{rok}} \approx 10^8 \text{ let.}$$

18. Zjistěte: kritickou teplotu, od níž je možno udržet termojadernou reakci ve směsi stejných množství deuteria a tritia, a také optimální teplotu a hodnotu součinu koncentrace a doby udržení při 30 % navrácení získané energie do reaktoru.

Potřebná data: energie uvolněná v reakci $d + t \rightarrow {}^4\text{He} + n$ činí 17.6 MeV, efektivní střední účinný průřez závisí na teplotě přibližně podle vztahu

$$\langle \sigma \cdot v \rangle = 1.0 \times 10^{-25} T^{4.5} \cdot \exp(-1.2 T^{0.5}) \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1},$$



a ztráty brzděním zářením mají velikost $5.1 \times 10^{-37} \cdot n^2 \cdot \sqrt{T} \text{ W/m}^3$ (n je koncentrace nábojů, a teplota T v obou vztazích je v keV), $1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$, Boltzmannova konstanta $= 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$.

Řešení: Jestliže absorpce záření vzniklého při skladné reakci je malá, pak chceme-li tuto reakci udržet, musí energie z ní získaná být větší než ztráty brzděním

zářením. Je-li $n/2$ koncentrace jader deuteria a obdobně $n/2$ koncentrace jader tritia, pak tato podmínka má tvar $P_r > P_{bz}$, kde

$$P_r = \frac{1}{4} n^2 \cdot E \cdot \langle \sigma \cdot v \rangle = 7.04 \times 10^{-38} \cdot n^2 \cdot T^{4.5} \cdot \exp(-1.2 T^{0.5}) \text{ W/m}^3$$

je energetický zisk reakce za jednotku času (E je energie z jedné reakce) a

$$P_{bz} = 5.1 \times 10^{-37} \cdot n^2 \cdot T^{0.5} \text{ W/m}^3$$

představuje ztráty brzdným zářením.

Tuto podmínku lze zapsat ve tvaru

$$T^4 \cdot \exp(-1.2 T^{0.5}) > 7.24,$$

odkud vyplývá, že kritickou teplotou je $T_k = 3 \text{ keV}$. (Poznamenejme, že podmínka není také splněna nad teplotou 300 keV.)

Protože obvykle nejsme schopni udržet částice v reaktoru po dlouhou dobu a nevracíme do něj veškerou získanou energii, musí být pro jeho činnost splněna silnější podmínka

$$\eta \cdot P_r > P_{bz} + P_u,$$

kde η charakterizuje množství do reaktoru navrácené energie a

$$P_u = 3 n \cdot k_B \cdot T / \tau$$

je energie ztracená díky úniku částic. Zde τ je doba jejich udržení a $3 k_B \cdot T$ je střední tepelná energie připadající na jedno jádro (teplota je zde v kelvinech).

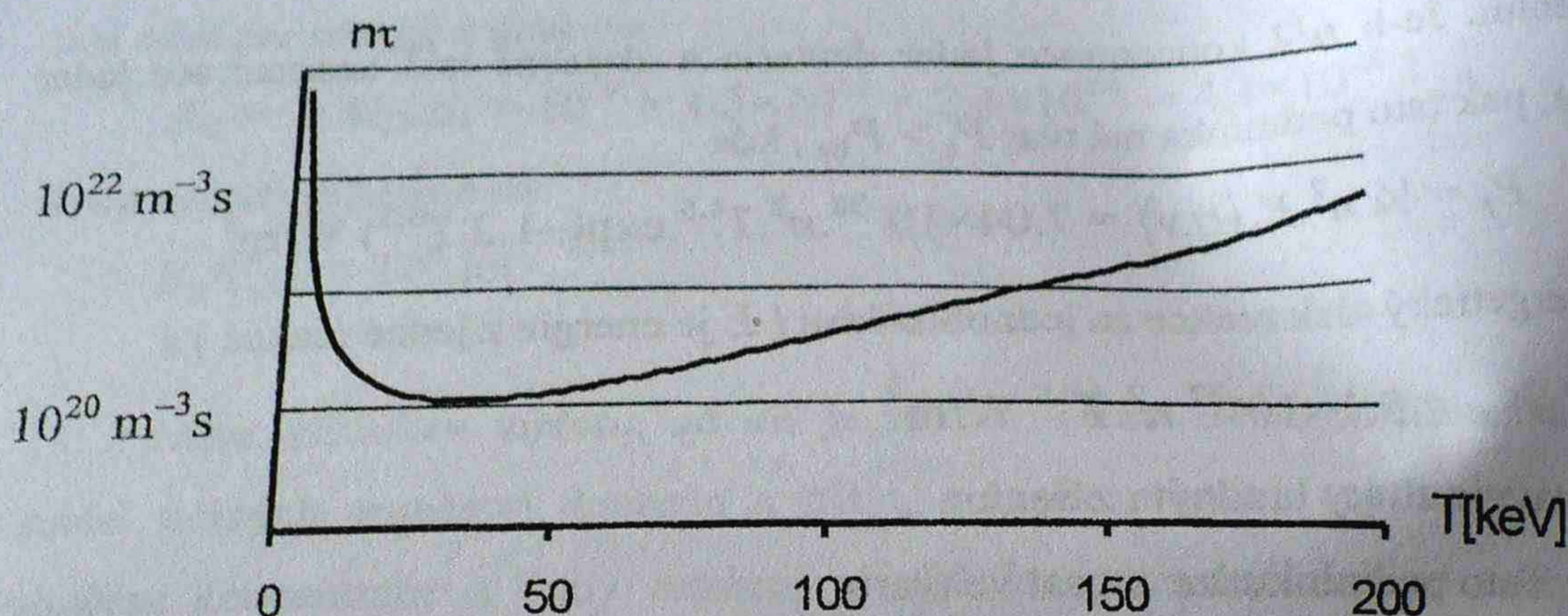
Uvedená podmínka má po dosazení tvar

$$\eta \cdot 7.04 \times 10^{-38} \cdot n^2 \cdot T^{4.5} \cdot \exp(-1.2 T^{0.5}) > 5.1 \times 10^{-37} \cdot n^2 \cdot T^{0.5} + 4.8 \times 10^{-16} \cdot n \cdot T / \tau,$$

kde jsme převedli pomocí vztahu $k_B \cdot T(\text{kelvin}) = 1.6 \times 10^{-16} T(\text{keV})$ teplotu z kelvinů na keV (vyjde $1 \text{ eV} = 11\,600 \text{ K}$). Odtud po úpravě

$$n \cdot \tau > 4.8 \times 10^{-16} / [\eta \cdot 7.04 \times 10^{-38} \cdot T^{3.5} \cdot \exp(-1.2 T^{0.5}) - 5.1 \times 10^{-37} \cdot T^{-0.5}],$$

což je tzv. Lawsonovo kritérium.



Minimální hodnotu součinu $n \cdot \tau$ zřejmě dostaneme tam, kde jmenovatel uvedeného výrazu má maximum. Podmínka extrému vyžaduje, aby výraz

$$\eta \cdot 7.04 \times 10^{-38} \cdot T^{2.5} \cdot \exp(-1.2 T^{0.5}) \cdot (3.5 - 0.6 T^{0.5}) + 2.55 \times 10^{-37} \cdot T^{-1.5}$$

byl roven nule. Pro nízké teploty je tento výraz kladný, pro vysoké záporný. Extrém je tedy skutečně maximem. Protože druhý člen je kladný, musí být při nulovosti celého výrazu první člen záporný, k čemuž dochází při $T > (3.5/0.6)^2 = 34$ keV. Pro $T = 35$ keV je již celý výraz záporný, optimální hodnota je tedy mezi 34 a 35 keV (numericky bychom našli hodnotu 34.2 keV).

Optimální teplotě odpovídající součin koncentrace a doby udržení má hodnotu

$$n \cdot \tau = 1.1 \times 10^{20} \text{ m}^{-3} \cdot \text{s} .$$

Za zmínku stojí, že pro tuto teplotu činí ztráta zářením pouze asi 0.6 % získané energie.

Poznámka: uvedená formule pro střední účinný průřez není zcela přesná a dává rozumný souhlas s experimentem pouze v oblasti od několika keV do přibližně 100 keV, mimo tuto oblast není souhlas s experimentem příliš dobrý. Získané hodnoty jsou ale reprezentativní.

20. Rozhodněte: na základě uvážení zákonů zachování platných ve fyzice základních částic, který z uvedených procesů nemůže nastat:

$$\begin{array}{lll}
 p^+ \rightarrow e^- + \tilde{\nu}_e & n \rightarrow p^+ + e^- & p^+ \rightarrow e^+ + \pi^0 \\
 n \rightarrow p^+ + e^- + \nu_e & n \rightarrow p^+ + e^- + \tilde{\nu}_\mu & p \rightarrow n + e^+ + \nu_e
 \end{array}$$

V uvedených vztazích označuje p proton, n neutron, e elektron, ν_e a ν_μ elektronové a mionové neutrino a π pion. Horní indexy označují náboj a vlnovky antičástice.

Řešení : Z uvedených procesů nemůže nastat ani jeden: v *prvním* procesu není zachován náboj, v *druhém* leptonové číslo (= počet leptonů minus antileptonů), v *třetím* není zachováno ani leptonové ani baryonové číslo (= počet baryonů minus antibaryonů). (Byť tento proces se objevil při úvahách o rozpadu protonu: povšimněte si, že tento rozpad zachovává rozdíl baryonového a leptonového čísla, což předpokládají některé současné teorie. V tomto ohledu je třetí proces "lepší" než druhý.) Ve *čtvrtém* procesu je znovu narušen zákon zachování leptonového čísla (pro zachování je třeba antineutrino $\tilde{\nu}_e$.) *Pátý* proces sice zachovává jak baryonové tak leptonové číslo, jenže leptonové číslo se zachovává i pro jednotlivé generace. *Šestý* proces splňuje jak zachování náboje, tak baryonového i leptonového čísla, ale je zakázán energeticky: bez dodání energie od další částice (tak je tomu např. v jádře) je nemožný (důvod $M_p < M_n$).

21. Tok vysokoenergetických neutrin ze Slunce obnáší přibližně 1/3 teoretické hodnoty.

Zjistěte: zda mohou neutrinové oscilace (experimenty naznačují jejich možnou existenci) objasnit tento jev. Uvažte, že CCl_4 -detektory jsou nejcitlivější na neutrina s energií = 5 MeV.

Řešení : Hypotéza neutrinových oscilací (částečně již potvrzená) předpokládá, že elektronové neutrino vznikající v procesech na Slunci není vlastním stavem operátoru hmotnosti a že tedy - v nejjednodušším případě - platí pro neutrinový interakční stav ν_e

$$\nu_e = \nu_1 \cdot \cos \Theta + \nu_2 \cdot \sin \Theta \quad ,$$

kde ν_1 a ν_2 jsou ortonormální vlastní stavy hmotnosti a Θ je tzv. směšovací úhel. (Neuvažujeme zde třetí známé neutrino.)

Protože hmotnosti neutrin 1 a 2 musí být různé (jinak, jak uvidíme, k oscilacím nedojde) a na počátku vzniklé neutrino ν_e má zřejmě určitou energii, budou hybnosti neutrin 1 a 2 různé, protože

$$p_{1,2} = \sqrt{\left(E^2/c^2 - m_{1,2}^2 \cdot c^2 \right)} \approx E/c - 1/2 m_{1,2}^2 c^3/E \quad ,$$

kde jsme uvážili experimentální výsledek, že pro hmotnosti neutrin platí $m_{1,2}^2 c^2 \ll E = 5 \text{ MeV}$.

Při šíření prostorem se fáze stavové funkce mění o faktor $\exp(ip x/\hbar)$ tak, že ve vzdálenosti x bude neutrinový stav popsán výrazem

$$\begin{aligned} \nu(x) = & \nu_1 \cdot \cos \Theta \cdot \exp\left[-im_1^2 c^3 / (2E\hbar) x\right] \\ & + \nu_2 \cdot \sin \Theta \cdot \exp\left[-im_2^2 c^3 / (2E\hbar) x\right] \end{aligned}$$

v němž jsme vynechali společný faktor $\exp[iE/(\hbar c)x]$.

Amplituda pravděpodobnosti pro zjištění neutrina ν_e je ovšem

$$\begin{aligned} \nu_e^* \cdot \nu(x) = & \cos^2 \Theta \cdot \exp\left[-im_1^2 c^3 / (2E\hbar) x\right] \\ & + \sin^2 \Theta \cdot \exp\left[-im_2^2 c^3 / (2E\hbar) x\right] . \end{aligned}$$

Příslušná pravděpodobnost je pak kvadrátem absolutní hodnoty tohoto výrazu:

$$\begin{aligned} P_\nu = & \cos^4 \Theta + \sin^4 \Theta + 2 \sin^2 \Theta \cdot \cos^2 \Theta \cdot \cos\left[\delta^2 c^3 / (2E\hbar) x\right] \\ = & 1 - \sin^2 2\Theta \cdot \left\{ 1 - \cos\left[\delta^2 c^3 / (2E\hbar) x\right] \right\} , \end{aligned}$$

kde jsme zavedli označení $\delta^2 = m_1^2 - m_2^2$.

Nejmenší hodnotou tohoto výrazu je $1 - \sin^2 2\Theta = \cos^2 2\Theta$ a tento výraz musí být zřejmě menší než $1/3$, abychom jev vysvětlili. To odpovídá $\Theta > 0.96$ rad. Druhou podmínkou je, aby změna vzdálenosti Slunce - Země v průběhu roku ($= 5 \times 10^6$ km) nevyvolávala výrazné oscilace neutrinového toku. To vede k podmínce na vlnovou délku oscilací $\lambda_{osc} = 4\pi E \hbar / (\delta^2 c^3) \gg 5 \times 10^6$ km, odkud $\delta^2 \ll 10^{-8}$ (eV)².

Ani jedna z těchto podmínek není v rozporu s měřeními na neutrinech z reaktorů. Neutrinové oscilace jsou tedy možným vysvětlením problému slunečních neutrin.

Poznámka: Poslední měření ukazují, že ze Slunce přichází i méně nízko-energetických neutrin.

21. Všechny kvarky mají baryonové číslo $B = 1/3$ a leptonové číslo $L = 0$, kvarky u (up) a c (charm) náboj $Q = 2/3$, kvarky d (down) a s (strange) náboj $Q = -1/3$ (náboj počítáme v násobcích elementárního náboje). Nenulovou podivnost S má pouze kvark s ($S = -1$) a nenulový půvab C pouze kvark c ($C = 1$). Antikvarky mají tato čísla opačná.

Navrhněte: možné kvarkové složení elektronu, fotonu, protonu, neutronu, hyperonu Ω , kladně nabitého pionu a kaonu a mezonu J/Ψ .

Potřebná data: Kvantová čísla uvedených částic jsou

	Q	L	B	S	C		Q	L	B	S	C
e^-	-1	1	0	0	0	Ω^-	-1	0	1	-3	0
γ	0	0	0	0	0	π^+	1	0	0	0	0
p	1	0	1	0	0	K^+	1	0	0	1	0
n	0	0	1	0	0	J/Ψ	0	0	0	0	0

Řešení : Z kvarků jsou složeny pouze hadrony, mezi něž nepatří ani elektron ani foton. Jich se tedy skládání z kvarků netýká. (U elektronu je to patrné z jeho leptonového čísla: jedničku nemůžeme dostat součtem nul.)

Následující tři částice jsou baryony (mají $B = 1$) a jsou tedy tvořeny třemi kvarky. Nejjednodušší vysvětlení dostaneme pro Ω^- hyperon, kde podivnost rovná -3 vede k identifikaci $\Omega^- = (sss)$. Proton a neutron jsou částice bez podivnosti a bez půvabu. Musí být tedy složeny z kvarků u a d . Uvažujeme-li elektrický náboj, pak snadno dojdeme k identifikaci $p = (uud)$ a $n = (udd)$.

Zbývající tři částice jsou mezony a ty jsou tvořeny dvojicemi kvark-antikvark. Nejjednodušší je zde identifikace kaonu K^+ , neboť ten musí obsahovat antikvark \tilde{s} (kvůli podivnosti), doplňující kvark může být díky náboji jen u nebo c , ale nulový půvab vede k identifikaci $K^+ = (u\tilde{s})$.

U pionu π^+ elektrický náboj dovoluje čtyři kombinace $(u\tilde{d})$, $(u\tilde{s})$, $(c\tilde{d})$, $(c\tilde{s})$, ale nulová podivnost a nulový půvab vyloučí všechny kromě první. Je tedy $\pi^+ = (u\tilde{d})$.

Pro mezon J/Ψ z uvedených údajů řešení nalézt nelze: elektrický náboj dovoluje osm kombinací $(u\tilde{d})$, $(c\tilde{c})$, $(d\tilde{d})$, $(s\tilde{s})$, $(u\tilde{c})$, $(c\tilde{u})$, $(d\tilde{s})$ a $(s\tilde{d})$. Nulová podivnost a nulový půvab vyloučí pátou až osmou kombinaci. Čtyři předchozí však zůstávají. Správná identifikace je $J/\Psi = (c\tilde{c})$.

odkud (substitucí $x = n - n_0$ a užitím příkladu 5.)

$$P_{n_0} = 1/\sqrt{[2\pi.N.p.(1-p)]}$$

Pro střední hodnotu pak dostaneme

$$\begin{aligned} \langle n \rangle &= P_{n_0} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} n \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2Np(1-p)}(n-n_0)^2\right\} dn \\ &= P_{n_0} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} n_0 \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2Np(1-p)}x^2\right\} dx + P_{n_0} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot \exp\left\{-\frac{1}{2Np(1-p)}x^2\right\} dx \\ &= n_0, \end{aligned}$$

neboť první integrál po substituci $x = n - n_0$ je původní "normovací" integrál a druhý je roven nule, protože jde o integrál liché funkce přes interval symetrický kolem nuly. Pro střední kvadratickou odchylku máme

$$\langle \Delta n^2 \rangle = 1/\sqrt{[2N.p.(1-p)]} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} (n-n_0)^2 \exp\left\{-\frac{1}{2Np(1-p)}(n-n_0)^2\right\} dn,$$

což je - (viz znovu příklad 5.) - rovno $N.p.(1-p)$.

Získané normální (Gaussovo) rozdělení má tedy stejnou střední hodnotu a stejnou střední kvadratickou odchylku jako původní binomické rozdělení a navíc je aproximuje v okolí maxima.

4. Ukažte: že při malé pravděpodobnosti realizace lze, v oblasti malých počtů výskytů z mnoha možných, aproximovat binomické rozdělení Poissonovým. Najděte střední hodnotu a střední kvadratickou odchylku tohoto rozdělení.

Řešení: Binomické rozdělení má tvar

$$P_n = N! / [n!(N-n)!] p^n (1-p)^{N-n}.$$

(Srovnejte s příkladem 1.) Náš případ zřejmě odpovídá situaci, kdy $p \ll 1$ a $n \ll N$. Pak můžeme položit

$$N!/(N-n)! \approx N^n$$

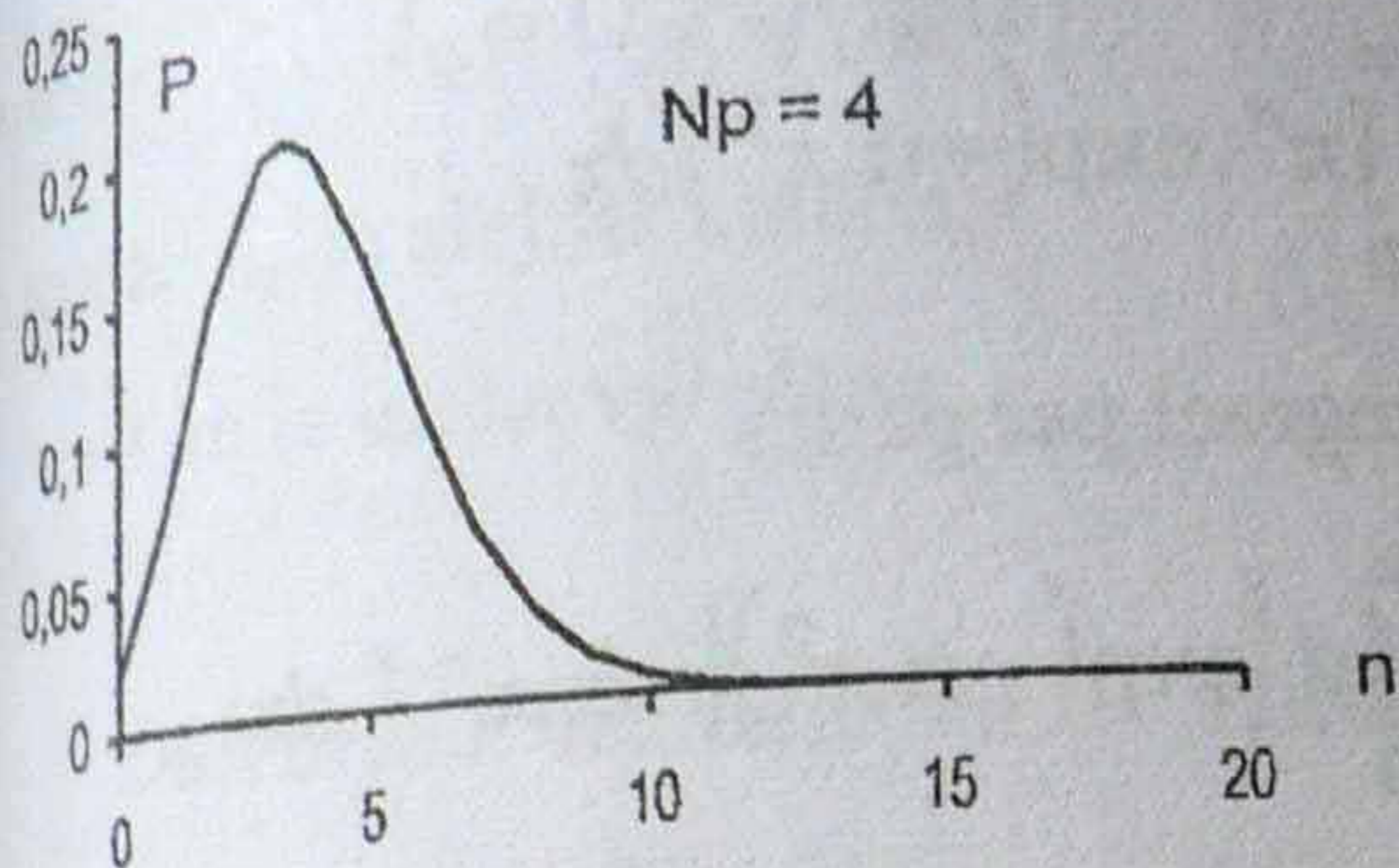
$$a \quad (1-p)^{N-p} \approx (1-p)^N = \left[(1-p)^{1/p} \right]^{Np} \approx \exp(-Np),$$

neboť pro malé p je $(1-p)^{1/p} \approx 1/e$.

Je tedy

$$P_n \approx (Np)^n / n! \cdot \exp(-Np),$$

což je Poissonovo rozdělení. I zde rozširujeme obor proměnných n do nekonečna. "Nefyzikálně" veliké hodnoty n jsou exponenciálně málo pravděpodobné.



né.

Pro střední hodnotu dostaneme

$$\begin{aligned} \langle n \rangle &= \sum_0^{\infty} n \cdot (N \cdot p)^n / n! \cdot \exp(-N \cdot p) \\ &= N \cdot p \cdot \sum_0^{\infty} (N \cdot p)^{n-1} / (n-1)! \cdot \exp(-N \cdot p) = N \cdot p, \end{aligned}$$

protože $\sum (N \cdot p)^{n-1} / (n-1)!$ představuje rozvoj $\exp(N \cdot p)$. (Stejným způsobem bychom dokázali, že rozdělení je normováno.) Protože $\langle n^2 \rangle = \langle n \cdot (n+1) \rangle + \langle n \rangle$, máme s použitím stejného postupu

$$\langle n^2 \rangle = (Np)^2 + Np$$

a pro střední kvadratickou odchylku dostáváme

$$\langle \Delta n^2 \rangle = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 = Np.$$

Střední hodnota počtu výskytů je tedy stejná jako u původního rozdělení a střední hodnota kvadratické odchylky je přibližně stejná, neboť pro $p \ll 1$ je $N \cdot p \cdot (1-p) \approx N \cdot p$.

Následující pomocný příklad ukazuje, jak se počítají ve statistické fyzice často se vyskytující tzv. Laplaceovy integrály.

5. Spočítejte: tzv. Laplaceovy integrály $L_n = \int_0^{\infty} x^n \cdot \exp(-\alpha \cdot x^2) dx$.

Řešení: K výpočtu použijeme pravidlo o integraci per partes

$$\begin{aligned} L_n &= \int_0^{\infty} \exp(-\alpha \cdot x^2) x^n dx = -1/2\alpha \int_0^{\infty} d[\exp(-\alpha \cdot x^2)]/dx \cdot x^{n-1} dx \\ &= -1/2\alpha \cdot \exp(-\alpha \cdot x^2) x^{n-1} \Big|_0^{\infty} + (n-1)/2\alpha \int_0^{\infty} \exp(-\alpha \cdot x^2) x^{n-2} dx. \end{aligned}$$

Protože exponenciála klesá rychleji než libovolná mocnina x , je první výraz roven nule a dostáváme rekurentní vztah

$$L_n = 1/2 (n-1)/\alpha \cdot L_{n-2}.$$

(Derivací Laplaceova integrálu L_{n-2} podle parametru α můžeme dostat jiný použitelný vztah $L_n = -dL_{n-2}/d\alpha$.) Spočteme-li první dva Laplaceovy integrály L_0 a L_1 , můžeme už spočítat všechny.

Integrál L_1 je jednoduchý. Je totiž

$$\begin{aligned} L_1 &= \int_0^{\infty} x \cdot \exp(-\alpha \cdot x^2) dx = -1/2\alpha \int_0^{\infty} d[\exp(-\alpha \cdot x^2)]/dx \cdot dx \\ &= -1/2\alpha \cdot [\exp(-\alpha \cdot x^2)]_0^{\infty} = 1/2\alpha. \end{aligned}$$

K výpočtu integrálu L_0 potřebujeme malý trik. Zřejmě

$$\begin{aligned} (2L_0)^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha \cdot x^2) dx \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha \cdot y^2) dy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-\alpha(x^2 + y^2)] dx \cdot dy \end{aligned}$$

Provedeme-li substituci do polárních souřadnic, dostaneme (s použitím výsledku pro L_1)

Statistická fyzika se zabývá i kinetickými procesy. Uvedené příklady jsou úvodní ilustrací popisu takových dějů.

25. Určete: jak závisí na čase vzdálenost, o kterou se v průměru vzdálí atom v plynu od své počáteční polohy. Odhadněte číselně.

Řešení: Předpokládáme, že mezi srážkami se atom pohybuje rovnoměrně přímočaře. Necht' \mathbf{r}_i je vektor odpovídající posunutí atomu během i -tého mezisrážkového období. Pak celkové posunutí je zřejmě $\mathbf{r} = \sum \mathbf{r}_i$. Protože posunutí různými směry jsou zřejmě stejně pravděpodobná, je střední posunutí $\langle \mathbf{r} \rangle = 0$. Střední kvadratická odchylka hodnot \mathbf{r} ale zřejmě nulová nebude. Je totiž

$$\langle \mathbf{r}^2 \rangle = \left\langle \sum_i \mathbf{r}_i^2 \right\rangle + \left\langle \sum_{i \neq j} \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_j \right\rangle = N \cdot l^2,$$

kde l^2 je střední kvadrát vzdálenosti uražené mezi srážkami a kde jsme uvážili, že díky nezávislosti posunutí je druhý člen roven nule. Charakteristická délka, na níž se atom vzdálí během N mezisrážkových období, je tedy $\sqrt{N} \cdot l$.

Počet srážek za čas t , a tedy i počet posunutí v této době je roven $N = t/\tau = \langle v \rangle \cdot t/l$, kde τ je střední doba mezi srážkami a $\langle v \rangle$ střední rychlost atomu. Protože střední rychlost atomu v plynu je rovna $\langle v \rangle = \sqrt{(8k_B T/\pi m)}$ (viz příklad 6.), zbývá spočítat střední vzdálenost mezi srážkami.

Tuto vzdálenost nalezneme následující úvahou: necht' všechny atomy stojí a zkoumaný atom se vůči nim pohybuje střední relativní rychlostí v_{rel} . Za jednotku času zřejmě narazí do atomů, které budou v "záchytném" prostoru o objemu $\pi d^2 \cdot v_{\text{rel}}$, kde d je průměr atomu. Počet takových atomů je $n \cdot \pi d^2 \cdot v_{\text{rel}}$, kde n je koncentrace atomů. Doba mezi dvěma srážkami je pak rovná $\tau = 1/(n \cdot \pi d^2 \cdot v_{\text{rel}})$ a

uražená vzdálenost $l = \langle v \rangle \cdot \tau = 1 / (n \cdot \pi \cdot d^2) \cdot \langle v \rangle / v_{rel}$. Protože $v_{rel} = \langle v \rangle \cdot \sqrt{2}$ (tento vztah dostaneme středováním výrazu $(v_1 - v_2)^2$) máme $l = 1 / (\sqrt{2} \cdot n \cdot \pi d^2)$. Obecnější tvar je pak $l = 1 / (\sqrt{2} \cdot n \cdot \sigma)$, kde σ je účinný průřez srážky (veličina πd^2 může sloužit jako jeho rozumný odhad).

Celkem tedy máme

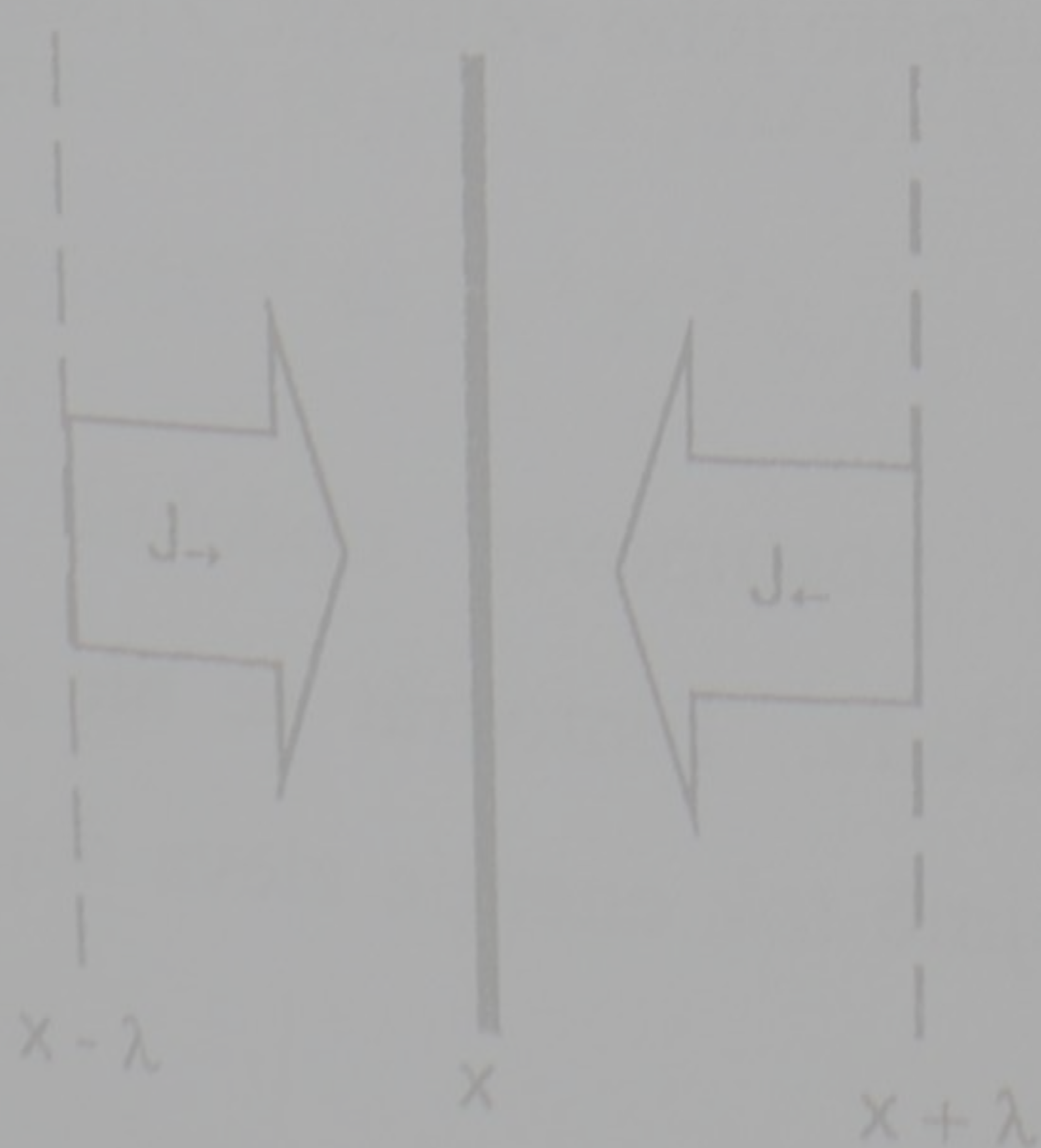
$$\langle r^2 \rangle = \langle v \rangle \cdot l \cdot t = \sqrt{(8k_B T / \pi \cdot m)} / (\sqrt{2} \cdot n \cdot \pi d^2) t .$$

Vzdálenost, do níž se může atom dostat, roste s odmocninou času.

Protože za běžných podmínek je střední rychlost v plynu přibližně 500 m/s a koncentrace atomů asi $2 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$, je při typickém poloměru molekuly asi 0.3 nm střední vzdálenost mezi srážkami asi $3 \times 10^{-7} \text{ m}$, střední doba mezi srážkami asi 1 ns a vzdálenost, do níž se dostane atom za 1s, asi 0.15 mm.

26. Zformulujte: jednoduchou Krönigovskou (viz příklad 7.) teorii difuze v plynu. Najděte vyjádření pro koeficient difuze a odhadněte jeho velikost. Zjistěte, jak závisí tento koeficient na teplotě.

Řešení : Necht' se v plynu mění koncentrace částic pouze ve směru osy x . V místě



o souřadnici x uvažujeme kolmou plošku jednotkové velikosti. Tok částic touto ploškou zleva doprava je zřejmě dán vztahem

$$j_{\rightarrow} = 1/6 \langle v \rangle \cdot n(x - \lambda),$$

neboť uvažujeme šestinový Krönigovský tok částic.

Započtená hustota má hodnotu odpovídající místu poslední srážky před uvažovanou ploškou a ta v průměru nastala ve vzdálenosti rovné střední volné dráze λ .

což vzhledem k nezávislosti řešení Φ_1 a Φ_2 dá

$$C_{11} \cdot \alpha + C_{21} \cdot \beta = L \cdot \alpha$$

$$C_{12} \cdot \alpha + C_{22} \cdot \beta = L \cdot \beta$$

Získané rovnice jsou rovnicemi pro vlastní hodnoty, které mají dvě nezávislá řešení. Máme tedy řešení splňující podmínku $\Phi(x+a) = L \cdot \Phi(x)$. Opakovaným užitím podmínky pak dostaneme

$$\Phi(x+n \cdot a) = L^n \cdot \Phi(x)$$

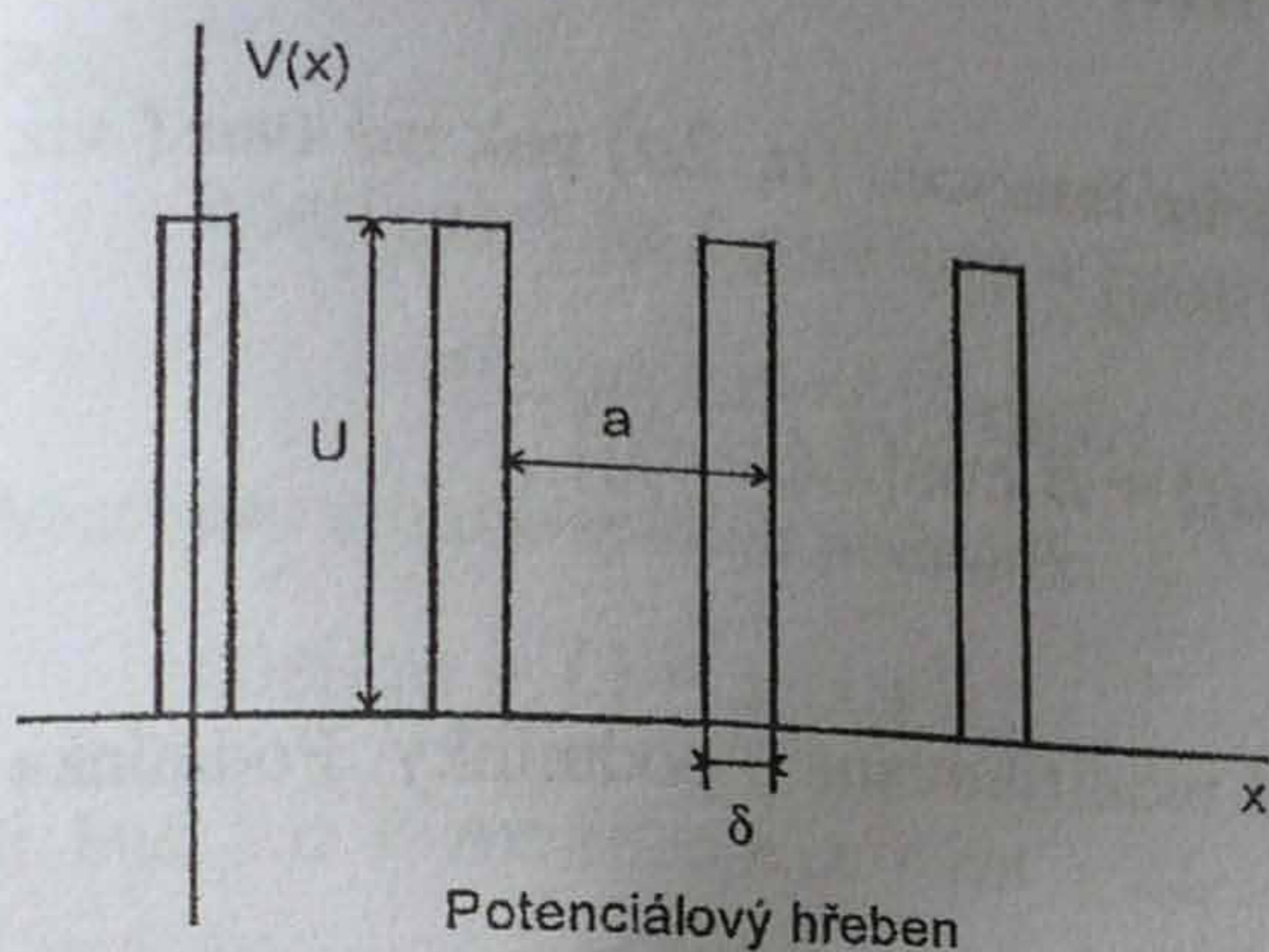
Položme nyní $L = \exp \kappa$ a sestrojme funkci $u(x) = \exp(-\kappa \cdot x/a) \cdot \Phi(x)$. Dokážeme, že funkce $u(x)$ je periodická. Zřejmě

$$\begin{aligned} u(x+a) &= \exp[-\kappa/a \cdot (x+a)] \cdot \Phi(x+a) \\ &= \exp(-\kappa \cdot x/a) \cdot \exp(-\kappa) \cdot \Phi(x+a) \\ &= \exp(-\kappa/a \cdot x) \cdot \Phi(x) = u(x) \end{aligned}$$

Řešení bude mít požadovaný tvar, ukážeme-li, že κ musí být ryze imaginární, pak stačí položit $K = -i\kappa/a$. Tak tomu ovšem musí být. V opačném případě řešení diverguje v $+\infty$ nebo v $-\infty$ a takové řešení nesplňuje standardní podmínky.

Poznamenejme, že záměna tzv. kvazivlnového čísla K na $K + 2\pi/a$ převede funkci $u(x)$ na novou periodickou funkci $u(x) \cdot \exp(i2\pi \cdot x/a)$. Lze se proto omezit na interval čísel K šířky $2\pi/a$. Obvykle volíme interval $(-\pi/a, \pi/a)$, tzv. první Brillouinovu zónu.

24. Najděte: energetické spektrum elektronu pohybujícího se v periodickém potenciálu $V(x)$ nenulovém pouze v okolí bodů $x = n \cdot a$ (a je perioda mřížky a n je celé číslo), kde $V(x) = U \neq 0$. Výpočet proveďte pro případ, kdy šířka



oblastí δ , kde $V \neq 0$, se blíží k nule a výška potenciálu U k nekonečnu, přičemž $U \cdot \delta = \text{konst.}$ (tzv. Kronigův-Penneyho model)

Řešení: Vzhledem k předchozímu příkladu stačí řešit úlohu jen v oblasti jedné periody, např. na intervalu $\langle 0, a \rangle$.

Podle standardních podmínek má být řešení spojitě. Najdeme ještě podmínku, jež je důsledkem "zuby" potenciální energie. K tomu Schrödingerovu rovnici naší úlohy

$$-\hbar^2/2m \cdot d^2\Phi/dx^2 + V(x) \cdot \Phi = E \cdot \Phi$$

integrujme přes oblast zuby v bodě a

$$-\hbar^2/2m \cdot \int_{a-\frac{1}{2}\delta}^{a+\frac{1}{2}\delta} d^2\Phi/dx^2 \cdot dx + \int_{a-\frac{1}{2}\delta}^{a+\frac{1}{2}\delta} V(x) \cdot \Phi \cdot dx = E \int_{a-\frac{1}{2}\delta}^{a+\frac{1}{2}\delta} \Phi \cdot dx$$

Až na veličiny vyššího řádu dostáváme

$$-\hbar^2/2m \cdot [\Phi'(a + \frac{1}{2}\delta) - \Phi'(a - \frac{1}{2}\delta)] + U \cdot \Phi(a) \cdot \delta = E \cdot \Phi(a) \cdot \delta$$

a v limitě $\delta \rightarrow 0$, při $U = \hbar^2/(2m\delta) \cdot P$ (vhodné označení limitní hodnoty), pak

$$\Phi'(a+0) - \Phi'(a-0) = P \cdot \Phi(a)$$

kde zápis $a+0$ ($a-0$) označuje limitu zprava (zleva). První derivace řešení již tedy není v případě nekonečného skoku potenciální energie spojitá.

Nyní sestrojme řešení. Na intervalu $(0, a)$ (zde již $\delta = 0$) je řešením

$$\Phi(x) = A \cdot \sin(k \cdot x) + B \cdot \cos(k \cdot x)$$

kde $\hbar^2 k^2 / 2m = E$. Řešení v následujícím intervalu $(a, 2a)$ pak má tvar (viz předchozí příklad),

$$\Phi(x) = \exp(iK.a) \cdot \{A \cdot \sin[k.(x-a)] + B \cdot \cos[k.(x-a)]\},$$

kde K je blochovské kvazivlnové číslo.

Zbývá uvážit standardní (poněkud modifikované) podmínky. Podmínka spojitosti dává

$$A \cdot \sin(k.a) + B \cdot \cos(k.a) = B \cdot \exp(iK.a)$$

a podmínka změny derivace

$$k.A \cdot \exp(iK.a) - k.[A \cdot \cos(k.a) - B \cdot \sin(k.a)] = P.B \cdot \exp(iK.a).$$

Tato soustava má netriviální řešení, pokud její determinant daný vztahem

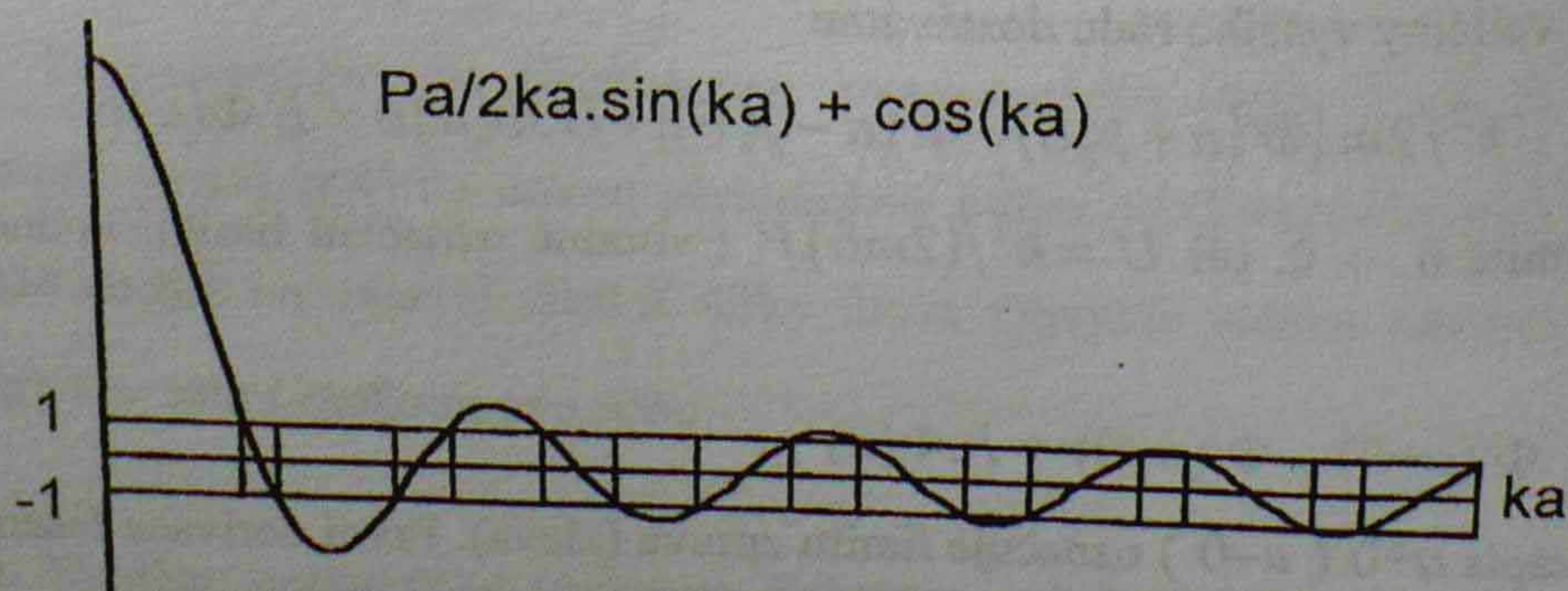
$$\sin^2(k.a) - P/k \cdot \exp(iK.a) \cdot \sin(k.a) + (\exp(iK.a) - \cos(k.a))^2$$

je nulový. Přímý výpočet s využitím Eulerova vztahu dá podmínku

$$\cos(K.a) = \cos(k.a) + P/2k \cdot \sin(k.a).$$

Dovolená k a tedy dovolené energie jsou tam, kdy lze nalézt vhodné K , a to lze pokud platí

$$|\cos(k.a) + P/2k \cdot \sin(k.a)| \leq 1.$$



Možná řešení pro k a tedy i pro energii zřejmě vytvářejí pásy hodnot (tzv. pásy dovolených energií oddělené pásy tzv. zakázaných energií). Meze pásů dovolených energií najdeme následujícím postupem: označme $P/2k = \text{tg } L$.

Pak

$$\begin{aligned}\cos(k.a) + \operatorname{tg} L \cdot \sin(k.a) &= [\cos(k.a) \cdot \cos L + \sin L \cdot \sin(k.a)] / \cos L \\ &= \cos(k.a - L) / \cos L.\end{aligned}$$

Mez pásu zřejmě splňuje podmínku

$$\cos(k.a - L) = \pm \cos L,$$

tj. buď $k.a = n\pi$ nebo $k.a = n\pi + 2L$.

Položíme-li $k.a = n\pi - \varepsilon$, kde ε je malé číslo, pak hodnota podílu levé strany a $\cos L$ je $(-1)^n \cdot (\cos \varepsilon + \operatorname{tg} L \cdot \sin \varepsilon) \approx (-1)^n \cdot (1 + \operatorname{tg} L \cdot \varepsilon)$ a je zjevně v absolutní hodnotě větší než 1. Zřejmě proto hodnoty $k.a = n\pi$ odpovídají horním mezím dovolených pásů a hodnoty $k.a = n\pi + 2L$ dolním mezím.

25. V metodě těsné vazby sestrojujeme vlnovou funkci elektronu pomocí blochovské kombinace lokálních funkcí.

Najděte: pro případ prosté krychlové soustavy vyjádření pro energii elektronu a spočítejte jeho efektivní hmotnost.

Řešení: Schrödingerovu rovnici pro krystal zapišme ve tvaru

$$-\hbar^2/2m \cdot \Delta\Phi + U(\mathbf{r}) \cdot \Phi = E \cdot \Phi$$

a její přibližné blochovské řešení ve tvaru

$$\Phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = 1/\sqrt{N} \cdot \sum_m \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{m}) \cdot \phi_0(\mathbf{r} - \mathbf{m}),$$

kde \mathbf{K} je blochovský kvazivlnový vektor, vektor \mathbf{m} čísluje uzly mřížky a $\phi_0(\mathbf{r})$ je lokální řešení v počátku ($\phi_0(\mathbf{r} - \mathbf{m})$ je pak lokální řešení v místě \mathbf{m}).

N označuje dostatečně velký počet uvažovaných iontů.

Energii odpovídající tomuto řešení odhadneme pomocí střední hodnoty

$$E(\mathbf{K}) = \int \Phi_{\mathbf{K}}^*(\mathbf{r}) \cdot [-\hbar^2/2m \Delta + U] \cdot \Phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \cdot dV =$$

Označíme-li $\alpha = (p \cdot \mu_p + n \cdot \mu_n)$ a $\beta = (p \cdot \mu_p^2 - n \cdot \mu_n^2)$, má podmínka nexistence příčného proudu tvar

$$\alpha \cdot E_y - \beta \cdot B \cdot E_x = 0$$

a pro podélný proud dostaneme

$$j_x / e = \alpha \cdot E_x + \beta \cdot B \cdot E_y .$$

Dosadíme-li za E_x do druhé rovnice, dostáváme po vynásobení B

$$j_x \cdot B / e = \alpha^2 / \beta \cdot E_y + \beta \cdot B^2 \cdot E_y .$$

Zanedbáme-li kvadratický člen v B , je

$$R_H = E_y / (j_x \cdot B) = \beta / (e \cdot \alpha^2) = (p \cdot \mu_p^2 - n \cdot \mu_n^2) / [e \cdot (p \cdot \mu_p + n \cdot \mu_n)^2] ,$$

což je hledané vyjádření pro Hallovu konstantu.

Pro vlastní polovodič je $p = n$ a tedy

$$R_H = 1 / (e \cdot n) \cdot (\mu_p^2 - \mu_n^2) / (\mu_p + \mu_n)^2 .$$

Zavedeme-li ještě podíl elektronové a děrové pohyblivosti b , lze psát

$$R_H = 1 / (e \cdot n) \cdot (1 - b^2) / (1 + b)^2 .$$

Na pevné látky může mít vliv i elektromagnetické záření.

36. Jakou plochu v ČR musíme pokrýt fotovoltaickými články, abychom získali zdroj elektrické energie odpovídající temelínské jaderné elektrárně. Odhadněte, kolik Temelínů bychom mohli za cenu těchto článků pořídit.

Potřebná data : průměrné denní osvětlení v ČR je cca 300 W/m^2 , špičková účinnost fotovoltaických článků cca 20 %, cena 1 m^2 solárního článku cca 20 000 Kč. Výkon temelínské elektrárny je 1 GW a její cena 100 GKč.

Řešení : Při špičkové účinnosti η získáme z 1 m^2 výkon $P_1 = \frac{1}{2} \eta E$, kde E je průměrný výkon dopadající na 1 m^2 a faktor $\frac{1}{2}$ započítává pro fotovoltaické

systémy nepříjemnou skutečnost, že v noci Slunce nesvíí. Číselně to činí $P_1 = 30 \text{ W/m}^2$. Potřebná plocha proto činí $S = P_T/P_1 = P_T/1/2\eta E$, což číselně dá $10^9/30 \approx 33 \times 10^6 \text{ m}^2 = 33 \text{ km}^2$.

Průměrný výkon 1 m^2 článku je ovšem 30 W , cena za 1 W je $20000 \text{ Kč}/30 = 666.7 \text{ Kč/W}$. U Temelína je dosaženo 100 Kč/W (jednoduchým dělením), což je cca $6.7 \times$ menší cena za investici. Postavili bychom tedy více než 6 Temelínů.

(Poznámka: cena za fotovoltaické články je jen hrubý odhad ceny fotovoltaické elektrárny. Část článků lze nahradit levnějšími zrcadly, ale naopak je třeba započítat cenu dalšího vybavení, např. pro akumulaci energie. Neuvážili jsme též, že při tak rozsáhlém nákupu fotovoltaických článků lze očekávat od prodejce množstevní slevu. Běžné dnešní odhady vedou k závěru, že náklady na fotovoltaickou elektrárnu jsou cca $5 \times$ vyšší než na jadernou.)

37. Spočítejte: absorpční koeficient volných elektronů v látce.

Řešení: Pohybová rovnice pro volný elektron v poli elektromagnetické vlny má přibližný tvar

$$m \cdot d^2x/dt^2 = -m/\tau \cdot dx/dt - e \cdot E \cdot \exp(i\omega \cdot t) ,$$

kde τ je relaxační doba a ostatní veličiny mají standardní označení. V této rovnici zanedbáváme vliv magnetického pole na pohyb elektronu. Při řešení této pohybové rovnice budeme navíc amplitudu vlny E považovat za konstantu, tj. zanedbáme prostorové změny intenzity elektrického pole vlny v oblasti, v níž se pohybuje elektron.

Ustálené řešení této rovnice má tvar

$$x = -e \cdot E / [m \cdot (i\omega/\tau - \omega^2)] \cdot \exp(i\omega \cdot t) .$$

Je-li v jednotce objemu n elektronů, vytváří se polarizace $P = -n \cdot e \cdot x$ a jí odpovídá susceptibilita

Dodatečné příklady k AJFY

1. Odhadněte velikost atomů, víte-li, že:

- 1 kapka 0,5 % roztoku kyseliny olejové v alkoholu vytvoří na vodě kruhovou olejovou skvrnu o průměru 32 cm, objem kapky je asi $0,02 \text{ cm}^3$ (Franklin),
- výparné teplo vody je $2,1 \text{ MJ/kg}$ a její povrchové napětí 72 mJ/m^2 (Weisskopf),
- aktivita $0,1 \text{ mg}$ polonia 210 činí $1,67 \times 10^{10} \text{ Bq}$, střední doba života je $1,7 \times 10^7 \text{ s}$ a jeho hustota je 9400 kg/m^3 .

Z odhadnuté velikosti atomu zjistěte, kolikrát byste museli rozpúlit větší jablko (1 dm^3), abyste získali kousek velikosti atomu. (Feynman)

Řešení :

a) Jedna kapka roztoku obsahuje $5 \times 10^{-3} \text{ V}$ kyseliny olejové ($V = 0,02 \text{ cm}^3$ je objem kapky). Plocha skvrny je $S = \pi D^2/4$, kde $D = 32 \text{ cm}$ je uvedený průměr. Tloušťka vrstvy odhadující rozměr atomu činí $d = 5 \times 10^{-3} \text{ V} / \pi D^2/4 = 2 \times 10^{-2} \text{ V} / \pi D^2 \approx 1,2 \times 10^{-7} \text{ cm} = 1,2 \times 10^{-9} \text{ m}$.

b) Při výparu 1 m^3 vody se spotřebuje $Q\rho V$ tepla ($Q =$ teplo výparné, $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ hustota vody a $V = 1 \text{ m}^3$). Toto teplo se spotřebuje na vytvoření povrchu jednotlivých molekul vody. Označíme-li velikost krychličky odpovídající 1 molekule d , pak vzniklý povrch činí $V/d^3 \cdot 6d^2 = 6V/d$ (počet krychliček \times povrch krychličky) a potřebná energie činí $6V\sigma/d$, kde σ je povrchové napětí vody. Porovnáním $d = 6\sigma/Q\rho \approx 2 \times 10^{-10} \text{ m}$.

c) Počet atomů v $m = 0,1 \text{ mg}$ polonia je $A\tau$ ($A =$ aktivita, $\tau =$ střední doba života). Objem uvedeného množství polonia je $V = m/\rho$, takže na 1 atom připadá objem $V_1 = m/\rho A\tau$ a rozměr atomu můžeme odhadnout jako $d = \sqrt[3]{V_1} = \sqrt[3]{(m/\rho A\tau)} \approx 3,3 \times 10^{-10} \text{ m}$.
Rozměr atomu (resp. molekuly) je tedy zřejmě řádově 10^{-10} m .

Při této velikosti atomu musíme jeden rozměr jablka zmenšit miliardkrát. Protože tisícnásobné zmenšení vyžaduje cca 10 řezů ($2^{10} \approx 1000$), potřebujeme pro jeden rozměr 30 řezů. Uvážíme-li 3 rozměry jablka je počet řezů trojnásobný, tj. 90.

2. Spočítejte výchylky v příčném elektrickém a příčném magnetickém poli při Thomsonově metodě určování měrného náboje elektronu a najděte vyjádření pro měrný náboj.

Řešení :

a) Pohyb v příčném elektrickém poli.

Elektron nechť vletá do kondenzátoru rychlostí v ve směru osy x a je vychylován polem mříčícím ve směru osy z . Pohybové rovnice mají zřejmě tvar

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = 0, \quad m \frac{d^2 y}{dt^2} = 0, \quad m \frac{d^2 z}{dt^2} = -eE,$$

kde m a $-e$ je hmotnost resp. náboj elektronu a E velikost působícího pole.

Vzhledem k počátečním podmínkám je $x = vt$ a $y = 0$ (počátek souřadnic na počátku kondenzátoru) a pro výchylku ve směru osy z dostaneme užitím

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = \frac{d}{dt} \left(\frac{dz}{dt} \right) = \frac{d}{dx} \left(\frac{dz}{dx} \cdot \frac{dx}{dt} \right) \frac{dx}{dt} = \frac{d^2 z}{dx^2} \cdot v^2$$

$$\frac{d^2 z}{dx^2} = -\frac{e}{mv^2} E$$

Odtud dvojí integrací (l je vzdálenost ke stínítku)

$$\Delta z = -\frac{e}{mv^2} \int_0^l \left(\int_0^x E dx \right) dx .$$

Integrujeme-li metodou per partes ($f = \int_0^x E dx$, $g = x$), dostaneme

$$\Delta z = -\frac{e}{mv^2} \left[l \int_0^l E dx - \int_0^l x E dx \right] = -\frac{e}{mv^2} \int_0^l (l-x) E dx .$$

Je-li délka kondenzátoru a a pole v kondenzátoru homogenní, pak

$$\int_0^l (l-x) E dx = a \left(l - \frac{a}{2} \right) E$$

a
$$\Delta z_E = -\frac{e}{mv^2} a \left(l - \frac{a}{2} \right) E .$$

b) Pohyb v příčném magnetickém poli.

Elektron nechť jako výše vletá do systému rychlostí v ve směru osy x . Magnetická indukce nechť míří ve směru osy y . Zjevně se bude pohyb dít v rovině xz . Pohybová rovnice pro z -složku pohybu má tvar

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = -\frac{e}{m} v_x B .$$

Odtud dostaneme postupem stejným jako výše

$$\frac{d^2 z}{dx^2} = -\frac{e}{mv_x^2} v_x B = -\frac{e}{mv_x} B \approx -\frac{e}{mv} B ,$$

když jsme ještě položili $v_x \approx v$, což platí, pokud je počáteční rychlost dosti velká.

Dvojím integrováním a integrací per partes dostaneme obdobně jako výše.

$$\Delta z = -\frac{e}{mv} \int_0^l (l-x) B dx .$$

Je-li magnetické pole homogenní a dosahuje až ke stínítku, pak

$$\int_0^l (l-x) B dx = \frac{l^2}{2} B$$

a
$$\Delta z_B = -\frac{e}{mv} \cdot \frac{l^2}{2} B .$$

V Thomsonově metodě vykompenzujeme obě výchylky, takže $\Delta z_E = \Delta z_B$. Vyloučením rychlosti pak dostaneme

$$-\frac{e}{m} = \Delta z \cdot \frac{4a}{d \cdot l^4} \left(l - \frac{a}{2} \right) \cdot \frac{U}{B^2} ,$$

když jsme ještě vyjádřili intenzitu elektrického pole E pomocí napětí na kondenzátoru U a vzdálenosti desek d . (Ovšem $E = U/d$.)

3. Určete ionizační energii He I, He II a C I Slaterovou metodou.

Řešení :

Ve Slaterově metodě je vazebná energie elektronu dána vztahem $E = (Z-\sigma)^2/n^{*2} \cdot Ry$, kde Z je nábojové číslo jádra, parametr σ popisuje stínění náboje jádra, n^* je efektivní kvantové číslo hladiny a $Ry = 13,6 \text{ eV}$ je tzv. Rydbergova energie.

Efektivní kvantové číslo je dáno přiřazením $n \rightarrow n^*$

n	1	2	3	4	5	6
n^*	1	2	3	3,7	4	5

Pro určení stínící konstanty jsou hladiny rozděleny do „slupek“ (1s), (2s, 2p), (3s, 3p), (3d), (4s, 4p), (4d), (4f), (5s, 5p), (5d) a (5f). Ve vlastní slupce je stínící konstanta rovna 0,35, kromě slupky (1s), tam je jen 0,3. Pro slupky typu (s,p) je stínění od nejbližší hlubší slupky 0,85, od hlubších 1. Pro slupky typu (d) a (f) je stínění od hlubších slupek rovné 1.

U He I s nábojovým číslem $Z = 2$ máme 2 elektrony ve stavu 1s. Stínící konstanta je rovna 0,3, takže efektivní náboj jádra činí 1,7. Protože efektivní kvantové číslo zůstává rovné 1, je energie jednoho elektronu rovna $E_1 = 1,7^2/1^2 Ry = 2,89 Ry$ a celková vazebná energie $E(\text{He I}) = 2E_1 = 5,78 Ry$.

Energie vazby He II (ion helia) je $E(\text{He II}) = 2^2/1^2 \cdot Ry = 4 Ry$ (není stínění!).

Energie ionizace He I je zřejmě $E_i(\text{He I}) = E(\text{He I}) - E(\text{He II}) = 1,78 Ry = 24,20 \text{ eV}$.

Experimentální hodnota činí 24,58 eV.

Ionizační energie He II je ovšem rovna $E(\text{He II})$ a vychází přesně (vodíkupodobný systém).

U C I máme 2 elektrony ve slupce 1s, 2 ve slupce 2s a 2 ve slupce 2p.

Dva elektrony ve slupce dávají příspěvek k vazebné energii rovný $2 \times (5,7)^2/1^2 \cdot Ry = 2 \times 32,49 Ry$ (stínění 0,3). Čtyři elektrony ve slupce (2s,2p) dávají příspěvek $4 \times 3,25^2/2^2 Ry = 4 \times 2,64 Ry$ (stínění $2 \times 0,85 + 3 \times 0,35 = 2,75$). Celkem $E(\text{C I}) = 75,54 Ry$.

U C II jsou ve slupce (2s,2p) jen tři elektrony, takže příslušný příspěvek je jen $3 \times 3,6^2/2^2 = 3 \times 3,24 Ry$ (stínění $2 \times 0,85 + 2 \times 0,35 = 2,4$). Celkem $E(\text{C II}) = 74,7 \text{ eV}$.

Ionizační energie je rovna rozdílu vazebných energií, $E_i(\text{C I}) = E(\text{C I}) - E(\text{C II}) = 0,84 Ry = 11,42 \text{ eV}$. Experimentální hodnota činí 11,26 eV.

4. Odhadněte energii základního stavu ionu molekuly H_2 metodou LCAO.

Řešení :

Hamiltonova funkce ionu molekuly vodíku při vzdálenosti molekul R je :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} - \frac{1}{R} \right),$$

kde r_1 a r_2 jsou vzdálenosti elektronu od jednotlivých jader.

Řešení budeme hledat v podprostoru funkcí tvaru $\Psi = a\Psi_1 + b\Psi_2$, tj. lineárních kombinací funkcí Ψ_1 a Ψ_2 představujících základní stavy atomu vodíku pro jádro v místě 1 resp. 2.

Odtud okamžitě :

$$\hat{H}\Psi = aE_a\Psi_1 - a\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_2} \Psi_1 + a\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R} \Psi_1 + bE_a\Psi_2 - b\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1} \Psi_2 + b\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R} \Psi_2,$$

kde E_a je energie základního stavu atomu vodíku.

Rovnice, kterou máme řešit je ovšem $\hat{H}\Psi = E\Psi$, takže pravá strana v této rovnici má tvar $E(a\Psi_1 + b\Psi_2)$.

Promítneme-li tuto rovnici do směru Ψ_1 resp. Ψ_2 (vynásobením komplexně sdruženými funkcemi Ψ_1^* resp. Ψ_2^* a integrací), dostaneme pro stacionární stav rovnice

$$(E_a - C + B)a + (E_a S - A + BS)b = E(a + bS)$$

$$(E_a S - A + BS)a + (E_a - C + B)b = E(aS + b),$$

kde $B = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$, $C = \int \Psi_1^* \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \Psi_1 dV$ je coulombovský, $A = \int \Psi_1^* \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \Psi_2 dV$ výměnný a

$S = \int \Psi_1^* \Psi_2 dV$ překryvový integrál.

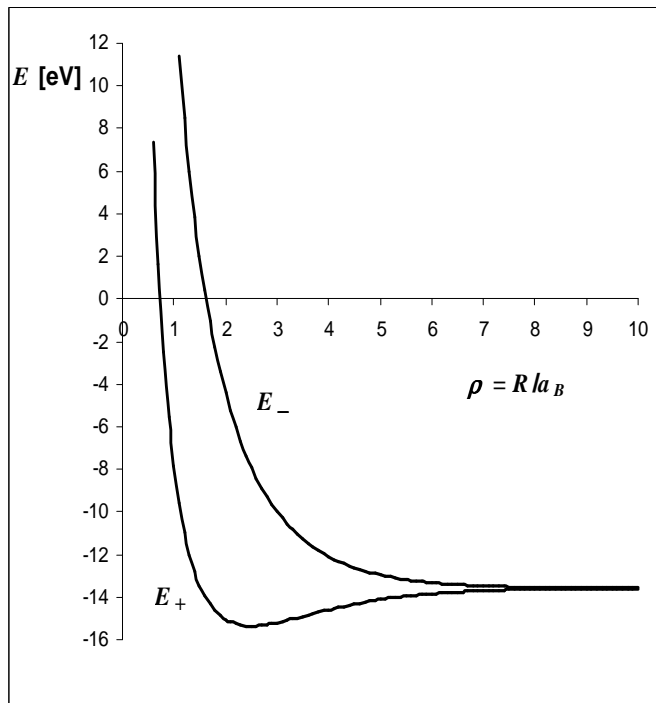
Řešení této dvojice rovnic je okamžité : Ze symetrie vyplývají řešení $a = b$, a $a = -b$, s energiemi $E_{\pm} = E_a + \frac{e}{4\pi\epsilon_0 R} - \frac{C \pm A}{1 \pm S}$.

Příslušné integrály jdou analyticky integrovat – užitím eliptických souřadnic. Dostali bychom

$$C = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_B} \frac{1}{\rho} (1 - (1 + \rho)e^{-2\rho}), \quad A = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_B} (1 + \rho)e^{-\rho}, \quad S = (1 + \rho + \frac{1}{3}\rho^2)e^{-\rho} \quad \text{při } \rho = \frac{R}{a_B}, \quad \text{kde}$$

$$a_B = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} \text{ je Bohrov poloměr.}$$

Průběh funkcí E_{\pm} je na obrázku :



Funkce E_- nemá minimum - vázaný stav se nevytvoří. Vzhledem k tomu, že příslušná funkce je antisymetrická bude větší pravděpodobnost výskytu elektronů „vně“ jader a příslušný elektronový mrak jádra nepřitáhne.

Funkce E_+ minimum má - to odpovídá vázanému stavu. Vzhledem k tomu, že příslušná funkce je symetrická, bude velká hustota pravděpodobnosti mezi jádry, v tomto případě elektronový mrak jádra přitahuje.

Numericky bychom zjistili, že minimální vzdálenost odpovídá $\rho = 2,5$ tj. 0,132 nm a vazebná energie systému je $-0,5646 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_B} = -15,35$ eV, což odpovídá disociační energii 1,76 eV. Experimentální hodnoty (= hodnoty z přesného výpočtu, který zde lze provést) jsou 0,106 nm a 2,79 eV.