Kapitola 3

Jednodimenzionální jednoduché systémy

V této kapitole budeme řešit několik konkrétních situací. V předcházející kapitole jsme odvodili stacionární Schrödingerovu rovnici pro systémy s hamiltoniánem, který explicitně nezávisí na čase. Jedná se o diferenciální rovnici. To, zda ji lze vyřešit jednoduše, nebo je její řešení natolik komplikované, že budeme muset sáhnout po přibližných či numerických metodách, závisí na tvaru hamiltoniánu daného systému.

Poznámka: V následujícím textu budeme pro jednorozměrné systémy vždy uvažovat vlnové funkce i potenciální energii jako funkce souřadnice, tj. $\psi = \psi(x)$ a $V = V(x)$; pro jednoduchost ale již proměnnou x nebudeme obvykle uvádět.

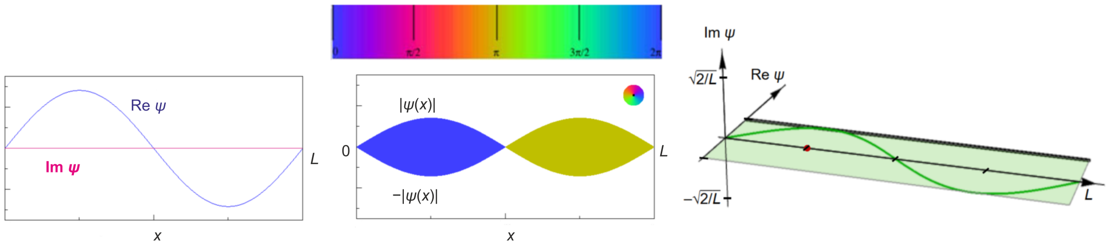
3.1 Jak zobrazit vlnovou funkci

Než se pustíme do řešení, zastavme se u toho, jaké máme možnosti zobrazení výsledků.

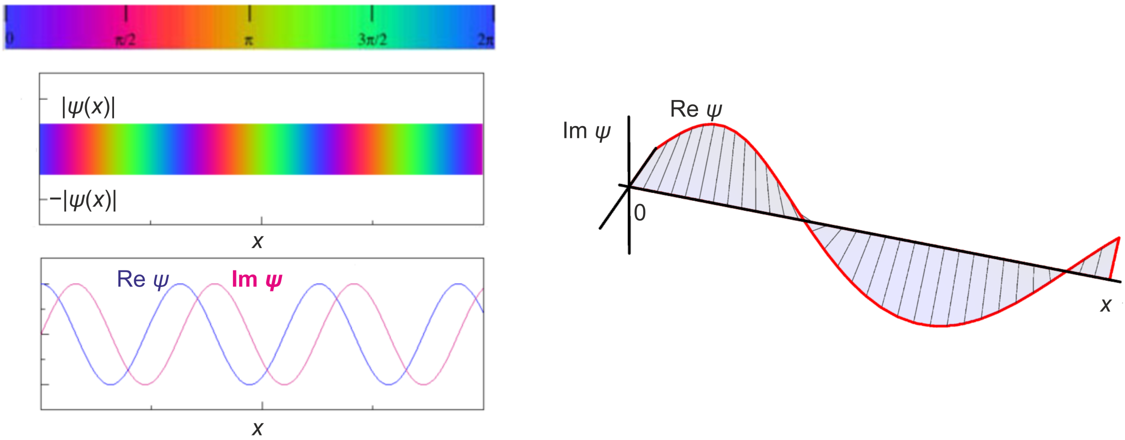
Úkol 3.1 Než budete číst dále, zkuste se zamyslet, jak byste zobrazili funkci, která má jednu reálnou proměnnou x a její hodnoty jsou komplexní čísla.

Vlnové funkce jsou komplexní funkce reálné proměnné, nabízí se tedy tyto možnosti:

- **Zobrazit zvlášť reálnou a imaginární část funkce** – toto zobrazení je jednoduché a přímočaré, ale protože pro nás je důležitější velikost a případně fáze funkčních



Obrázek 3.1: Různá zobrazení vlnové funkce $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)$



Obrázek 3.2: Různá zobrazení vlnové funkce $\psi(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{px}{\hbar}}$

hodnot (nikoli rozdělení na hodnoty reálné a imaginární), není tento způsob příliš názorný,

- **Využít při zobrazení komplexních hodnot Gaussovu rovinu** – jedná se o tedy o třídimenzionální graf, kde na jedné ose je proměnná vlnové funkce x a do roviny kolmé na tuto osu zakreslujeme komplexní hodnoty jako do Gaussovy roviny,
- **Zobrazit velikost a fázi funkčních hodnot** – velikost a fázi můžeme zobrazit každou zvlášť do dvou grafů, používá se ale spíše naznačení fáze pomocí barvy do grafu velikosti vlnové funkce $|\psi(x)|$, případně do grafu hustoty pravděpodobnosti $\rho(x) = |\psi(x)|^2$.

Všechny možnosti zobrazení můžete porovnat na obrázku 3.1, na kterém je zobrazena vlnová funkce[1] $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)$ v intervalu $0 < x < 2L$, a na obrázku 3.2 pro funkci $\psi(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{px}{\hbar}}$ popisující stav s ostrou hodnotou hybnosti a kinetické energie.

Řešeními stacionární Schrödingerovy rovnice jsou ale komplexní vlnové funkce, které jsou

[1] Jak později uvidíme, jedná se o stacionární stav v tzv. nekonečně hluboké potenciálové jámě – viz kapitola 3.7.

kromě souřadnice x závislé i na čase t. Nejjednodušší způsob znázornění časové závislosti je udělat graf animovaný, případně naznačit časový průběh několika grafy, které zachycují vlnovou funkci v po sobě jdoucích okamžicích.

Úkol 3.2 Uvažujme funkce zobrazené na obrázcích 3.1 a 3.2, tedy:

- $\psi(x,t) = \sin(kx)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{Et}{\hbar}}$, kde k je reálná konstanta, uvažujte $0 < x < \frac{2\pi}{k}$, pro ostatní hodnoty x je vlnová funkce nulová (jedná se o řešení tzv. nekonečně hluboké pravoúhlé potenciálové jámy, viz kapitola 3.7) a
- $\psi(x,t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{px-Et}{\hbar}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{px}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{Et}{\hbar}}$, tj. společnou vlastní funkci operátorů hybnosti $\hat{p}$ a kinetické energie $\hat{T}$, p je vlastní hodnota hybnosti (reálná konstanta) a $E = \frac{p^2}{2m}$ vlastní hodnota kinetické energie (toto jsme odvodili v úloze 7).

Nejprve si nakreslete závislost těchto funkcí na souřadnici x v čase $t = 0$. Poté diskutujte, jak se budou měnit v čase. Nakonec si časový průběh prohlédněte v apletech a porovnejte se svým řešením:

- QuVis: https://www.st-andrews.ac.uk/physics/quvis/simulations_html5/sims/TimeDevelopment/TimeDevelopment.html (vpravo dole je třeba si zapnout zobrazení správné vlnové funkce)
- Physlet Quantum Physics: https://www.compadre.org/PQP/quantum-theory/section8_2.cfm

3.2 Řešení stacionární Schrödingerovy rovnice pro konstantní potenciální energii

Nejdříve budeme řešit stacionární Schrödingerovu rovnici pro jednu částici v jednorozměrném prostoru v nějakém intervalu, kde je potenciální energie konstantní, tj. $V(x) = V = konst$.

$$\hat{H}\psi = E\psi,$$

$$(\hat{T} + \hat{V})\psi = E\psi,$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V\right)\psi = E\psi,$$

což po úpravě dává rovnici

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\psi = 0. \tag{3.1}$$

Rovnice 3.1 je homogenní diferenciální rovnicí druhého řádu s konstantními koeficienty.[2] Její řešení má tvar $\psi = e^{\alpha x}$, dosazením do rovnice 3.1 a zkrácením $e^{\alpha x}$ tak dostáváme:

$$\alpha^2 + \frac{2m(E-V)}{\hbar^2} = 0. \tag{3.2}$$

Nyní se řešení problému rozpadá na dvě části podle toho, zda je $E > V$ nebo $E < V$.

Řešení pro $E > V$

Uvažujme nejprve klasicky: Je-li celková energie E částice větší než potenciální energie V, znamená to, že kinetická energie částice $T = E-V$ je kladná, což je v pořádku.

Pokračujme v řešení rovnice 3.1. Rovnice 3.2 nemá reálná, ale ryze imaginární řešení

$$\alpha_{1,2} = \pm \mathrm{i}\sqrt{\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}} \stackrel{\text{def}}{=} \pm \mathrm{i}k$$

. Rovnice 3.1 má tedy dvě nezávislá řešení, která můžeme zkombinovat:

$$\psi = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, \tag{3.3}$$

kde $A, B \in \mathbb{C}$ jsou integrační konstanty a $k = \sqrt{\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}}$.

Komentáře:

- Jedná se o funkce, které odpovídají stavům s ostrou hodnotou kinetické energie (viz strana 51). První člen tedy odpovídá situaci, kdy má částice kladnou hybnost = „letí vpravo“ a druhý člen odpovídá záporné hybnosti = „pohybu vlevo“.

- Protože platí $e^{ikx} = \cos(kx) + \mathrm{i}\sin(kx)$, je patrné, že reálná i imaginární část nalezené vlnové funkce má v prostoru harmonický průběh s frekvencí k. Pokud bychom tedy zvyšovali energii částice E, bude růst také k a tedy i frekvence reálné i imaginární části vlnové funkce.

- Vzhledem k harmonickému průběhu nelze nalezená řešení normovat na neomezeném intervalu obvyklým použitím normovací podmínky 2.4, ale je třeba přejít k normování na konečný objem nebo normování na Diracovu δ-funkci.

- Ve speciálním případě pro $V = 0$ mluvíme o tzv. volné částici.

[2] Tento typ rovnice známe již z mechaniky, kde jsme se s ní potkali při řešení harmonického oscilátoru.

Řešení pro $E < V$

Opět nejprve klasicky: Je-li celková energie E částice menší než potenciální energie V, je kinetická energie $T = E - V$ záporná, což v klasické fyzice vůbec není možné. Takže bychom mohli být v pokušení prohlásit, že tento případ je nefyzikální a dál ho neřešit. Nebudeme ale ukvapení, vyřešíme rovnici 3.1 i pro tento případ a uvidíme, zda získaná řešení povedou k fyzikálně smysluplným závěrům. Rovnice 3.2 má dvě reálná řešení:

$$\alpha_{1,2} = \pm\sqrt{\frac{2m(V-E)}{\hbar^2}} = \pm\sqrt{\frac{2m|E-V|}{\hbar^2}}.$$

Řešení rovnice 3.1 je pak tedy:

$$\psi = A\mathrm{e}^{\alpha x} + B\mathrm{e}^{-\alpha x}, \tag{3.4}$$

kde $A{,}B \in \mathbb{C}$ jsou integrační konstanty a $\alpha = \sqrt{\frac{2m|E-V|}{\hbar^2}}$.

Komentáře:

- Nalezené řešení je součtem dvou reálných exponenciál. Z toho je patrné, že na neomezeném intervalu, tj. v limitách pro $x \to \pm\infty$ zjevně diverguje. Nelze ho tedy na takovém intervalu normovat. Neexistuje tedy vlnová funkce, pro kterou by platilo $E < V$ na celém prostoru.

- Na jednostranně omezeném intervalu lze jako řešení rovnice 3.1 připustit vždy jen tu exponenciálu, která na něm nediverguje, tj. $e^{\alpha x}$ na intervalu $(-\infty,\ a)$ a $e^{-\alpha x}$ na intervalu $(a,\ +\infty)$, kde $a \in \mathbb{R}$.

- Na oboustranně omezeném intervalu lze uvažovat obě nalezená řešení.

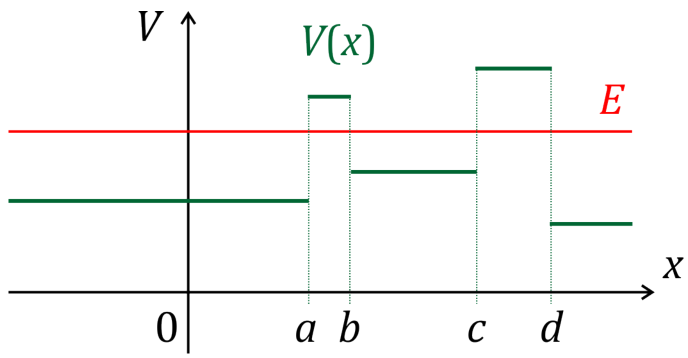
Jak již bylo řečeno, v klasické mechanice není možné, aby se částice vyskytovala v oblastech, kde je celková energie menší než energie potenciální, tj. kinetická energie by zde byla záporná. V kvantové fyzice ale uvidíme, že pro splnění postulátů o vlnové funkci bude vlnová funkce nenulová i v místech, kam se v klasické fyzice částice nemůže dostat. To ale jinými slovy znamená, že v těchto místech je nenulová pravděpodobnost nalezení částice.

Úkol 3.3 Nakreslete, jak vypadají vlnové funkce pro různé hodnoty E a V. Diskutujte, jak se řešení proměňuje, pokud se mění hodnota E.

Pro kontrolu můžete použít animaci/aplet dostupný na adrese
http://fyzweb.cz/materialy/qm-potencialy/.

3.3 Po částech konstantní potenciální energie – napojování řešení

Předcházející úlohu nyní zobecníme na situaci, ve které bude potenciální energie $V(x)$ popsána po částech konstantní funkcí – příklad takové funkce je znázorněn zeleně na obr. 3.3. Problém budeme řešit opět pro jednu částici s celkovou energií E, jejíž hodnota je v obrázku znázorněna červeně.



Obrázek 3.3: Po částech konstantní potenciální energie

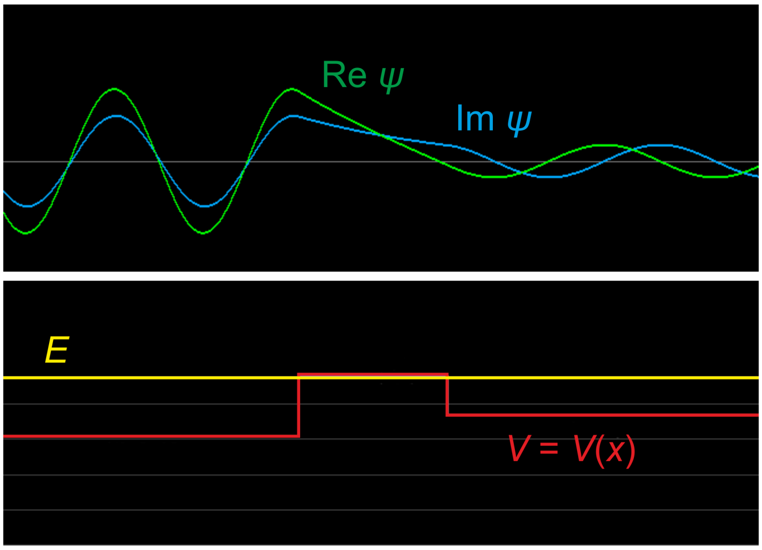
V k-tém intervalu označíme potenciální energii V_k a vyřešíme na tomto intervalu stacionární Schrödingerovu rovnici:

$$(\hat{T} + \hat{V}_k)\psi = E\psi.$$

V našem konkrétním příkladě znázorněném na obr. 3.3 tak můžeme – na základě předcházející podkapitol (konkrétně vztahů 3.3 a 3.4) zapsat obratem řešení v jednotlivých intervalech:

- v intervalu $(-\infty,a)$: $\psi = A\mathrm{e}^{ikx} + B\mathrm{e}^{-ikx}$, $k = \sqrt{\frac{2m(E-V_1)}{\hbar^2}}$
- v intervalu (a,b): $\psi = C\mathrm{e}^{\alpha x} + D\mathrm{e}^{-\alpha x}$, $\alpha = \sqrt{\frac{2m|E-V_2|}{\hbar^2}}$
- v intervalu (b,c): $\psi = F\mathrm{e}^{ilx} + G\mathrm{e}^{-ilx}$, $l = \sqrt{\frac{2m(E-V_3)}{\hbar^2}}$
- v intervalu (c,d): $\psi = H\mathrm{e}^{\beta x} + J\mathrm{e}^{-\beta x}$, $\beta = \sqrt{\frac{2m|E-V_4|}{\hbar^2}}$ ... atd.

Získali jsme tedy řešení stacionární Schrödingerovy rovnice na jednotlivých intervalech. Na každém intervalu máme dvě zatím neznámé integrační konstanty. Po vlnové funkci ovšem také požadujeme, aby byla na celém prostoru spojitá a spojitě diferencovatelná – jinými slovy, musíme zajistit tyto její vlastnosti i v bodech nespojitosti potenciální energie (hovoříme o tzv. „sešívacích podmínkách“).



Obrázek 3.4: Příklad „sešívání“ řešení v jednotlivých intervalech

Například v bodě a tyto požadavky vypadají následovně:
• Požadavek spojitosti v $x = a$:

$$Ae^{ika} + Be^{-ika} = Ce^{\alpha a} + De^{-\alpha a}$$

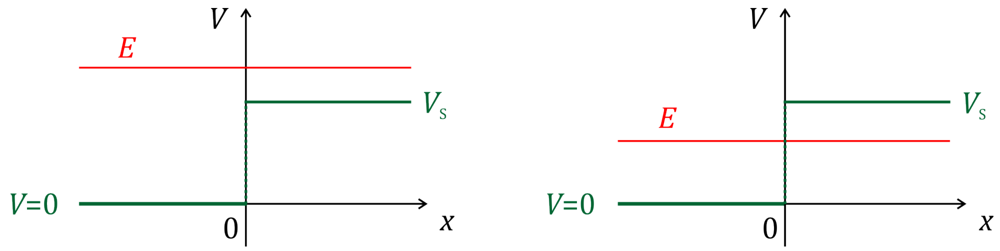
• Požadavek spojité diferencovatelnosti v $x = a$:

$$ikAe^{ika} - ikBe^{-ika} = \alpha Ce^{\alpha a} - \alpha De^{-\alpha a}$$

Oba požadavky dohromady představují dvě rovnice pro čtyři neznámé A, B, C a D. V dalším bodě nespojitosti potenciální energie, bodě b, bychom podobné dvě rovnice dostali pro neznámé C, D, F a G a stejně tak by se vše opakovalo v dalších bodech nespojitosti. Vidíme, že zadáním hodnot integračních konstant v jednom z intervalů jsou díky požadavkům na spojitost a hladkost určeny i všechny ostatní integrační konstanty a tedy podoba celé vlnové funkce. Příklad napojování řešení v jednotlivých intervalech je na obrázku 3.4.

Úkol 3.4 Napojování řešení můžete také modelovat apletu zmíněném výše.

http://fyzweb.cz/materialy/qm-potencialy/



Obrázek 3.5: Vlevo situace pro $E > V_S$, vpravo pro $0 < E < V_S$

3.4 Potenciálový schod (stupeň)

Poznatky z předcházející kapitoly nyní budeme aplikovat na tzv. potenciálový stupeň výšky V_S, kde nespojitost potenciální energie umístíme do bodu $x = 0$.[3] Řešení rozdělíme na dvě části podle celkové energie E částice.

Úkol 3.5 Než se pustíme do řešení potenciálového schodu pro jednotlivé situace, vytvořte si zadaný průběh potenciální energie v programu a prohlédněte si, jak vypadají řešení pro různé hodnoty energie. Získané tvary vlnových funkcí a jejich změny vyvolané změnou E popište.

Řešení pro $E > V_S$

Situace je zachycena na obr. 3.5 vlevo. Nespojitost potenciální energie v bodě $x = 0$ rozděluje řešení Schrödingerovy rovnice na dva intervaly, na kterých snadno najdeme řešení srovnáním s rovnicí 3.3:

- Pro $x < 0$: $\psi = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$, kde $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$,
- Pro $x > 0$: $\psi = C\mathrm{e}^{\mathrm{i}lx} + D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}lx}$, kde $l = \sqrt{\frac{2m(E-V_S)}{\hbar^2}}$.

Teď bychom mohli napsat podmínky spojitosti a hladkosti vlnové funkce v bodě $x = 0$ a najít vztahy mezi integračními konstantami. Než to ale uděláme, pozměníme mírně náš pohled na zkoumanou situaci – představme si, že chceme zkoumat situaci, kdy naše částice

[3]Grafy potenciální energie, ale i názvosloví převzaté z úvah o tíhovém poli někdy svádí k představě, že částice (elektron) opravdu musí překonat nějaký schod, překážku ve smyslu vyvýšeniny v prostoru. Ve skutečnosti jde ale o stupeň v potenciální energii, což lze v případě nabitého elektronu mnohem jednodušeji realizovat pomocí elektrostatického pole, tj. např. elektron se pohybuje ve dvou navazujících trubkách, které jsou udržovány na odlišných potenciálech. „Schod“ je představován přechodem z jedné trubky do druhé.

nalétává zleva na potenciálový schod a my chceme určit, jaká je pravděpodobnost, že částice projde do druhé části, a jaká je pravděpodobnost, že se odrazí zpět.[4]

Jednotlivým částem řešení výše tak můžeme připsat následující význam:

- Člen $A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ je vlastní funkcí operátoru hybnosti (viz 2.33) s vlastní hodnotou hybnosti rovnou $p = \sqrt{2mE}$; klasicky by tedy šlo o částici, která by se pohybovala směrem doprava (ve směru osy x), tj. takovou, která na schod „nalétává“.[5]

- Člen $B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$ je také vlastní funkcí operátoru $\hat{p}$ a přísluší vlastnímu číslu s opačným znaménkem než předchozí člen, klasicky by tedy šlo o částici pohybující se v opačném směru, tj. takovou, která se od schodu „odrazila“.

- Člen $C\mathrm{e}^{\mathrm{i}lx}$ je roven vlastní funkci $\hat{p}$ s vlastní hodnotou $\hbar l = \sqrt{2m(E - V_S)}$, tato hybnost odpovídá kinetické energii $E - V$, což by byla kinetická energie částice letící směrem doprava v místech s vyšším potenciálem.

- Analogicky člen $D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}lx}$ by klasicky odpovídal částici, která by v místě vyššího potenciálu letěla vlevo. My ale budeme studovat pouze takové situace, kdy částice přicházejí zleva, proto položíme $D = 0$.

S uvážením posledního uvedeného bodu pak „sešívací“ podmínky v $x = 0$ vypadají následovně:

- požadavek spojitosti v $x = 0$: $A + B = C$,
- požadavek hladkosti v $x = 0$: $A\mathrm{i}k - B\mathrm{i}k = C\mathrm{i}l$.

Z těchto dvou rovnic vyjádříme koeficienty B a C jako násobky A:

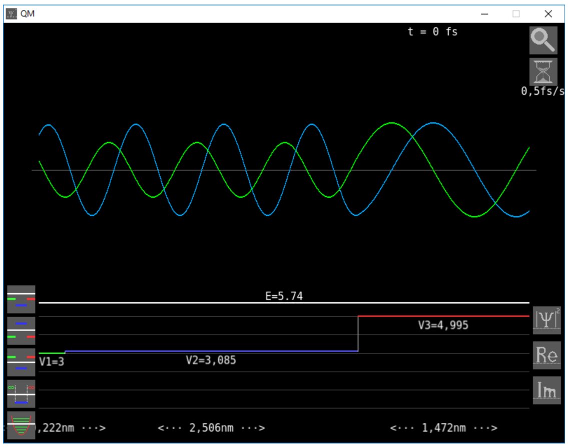
$$B = \frac{k-l}{k+l}A, \qquad C = \frac{2k}{k+l}A. \tag{3.5}$$

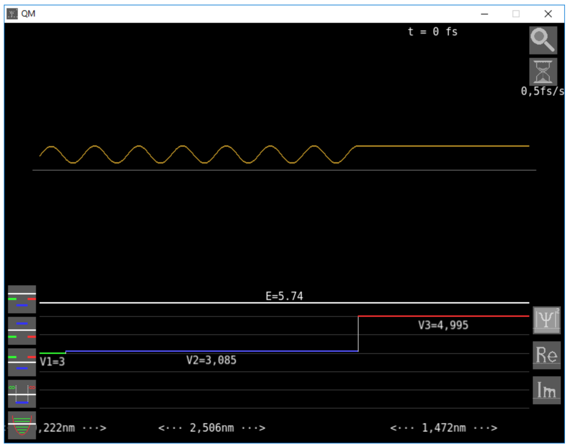
Výsledná vlnová funkce tedy bude obsahovat pouze koeficient A, jehož hodnotu lze určit z normovací podmínky.

Jak již bylo řečeno, naším cílem je určit pravděpodobnost, že se částice na potenciálovém schodu odrazí, resp. projde za něj. Vhodnou veličinou, která tyto skutečnosti popíše, je

[4]Tato úloha by v klasickém případě byla triviální, částice má vyšší energii, než je výška potenciálového schodu, a není tedy důvod, proč by neprošla za schod, tj. pravděpodobnost průchodu by byla 1, pravděpodobnost odrazu 0.

[5]Pro někoho může být obtížné si představit, že vlnová funkce ve tvaru rovinné vlny odpovídá nalétávající částici. V takovém případě může pomoci představa, že se jedná o souvislý proud částic. Pravděpodobnost odrazu, resp. průchodu by potom odpovídala tomu, jaký podíl částic se odrazí, resp projde.





Obrázek 3.6: Vlnová funkce pro potenciálový schod v případě, že $E > V_S$ – vlevo její reálná (zeleně) a imaginární (modře) část, vpravo hustota pravděpodobnosti nalezení částice

hustota toku pravděpodobnosti (viz 2.78), která má v jednorozměrném případě tvar:

$$j = \frac{\hbar}{2\mathrm{i}m}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)$$

Určíme nyní hustotu toku pravděpodobnosti j_I pro tu část vlnové funkce, jejíž klasickou analogií by byla částice přilétávající k potenciálovému schodu, tedy pro člen Ae^{ikx}:

$$j_I = \frac{\hbar}{2\mathrm{i}m}\left(A^*\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\frac{\partial A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{\partial x} - A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\frac{\partial A^*\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}}{\partial x}\right) = \frac{\hbar k}{m}|A|^2.$$

Podobně lze určit hustotu toku pravděpodobnosti odražených částic j_R (pro člen Be^{-ikx})

$$j_R = \frac{\hbar}{2\mathrm{i}m}\left(B^*\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\frac{\partial B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}}{\partial x} - B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\frac{\partial B^*\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}}{\partial x}\right) = -\frac{\hbar k}{m}|B|^2 = -\frac{\hbar k}{m}\left(\frac{k-l}{k+l}\right)^2|A|^2.$$

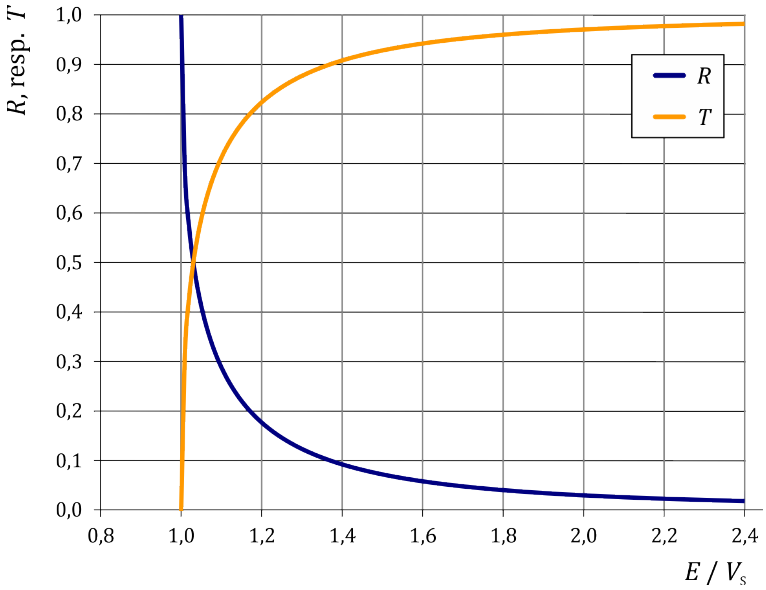
Můžeme si všimnout, že tok vyšel záporný, což odpovídá naší klasické analogii částice pohybující se vlevo.

A také určíme hustotu toku pravděpodobnosti prošlých částic j_T (pro člen Ce^{ilx})

$$j_T = \frac{\hbar}{2\mathrm{i}m}\left(C^*\mathrm{e}^{-\mathrm{i}lx}\frac{\partial C\mathrm{e}^{\mathrm{i}lx}}{\partial x} - C\mathrm{e}^{\mathrm{i}lx}\frac{\partial C^*\mathrm{e}^{-\mathrm{i}lx}}{\partial x}\right) = \frac{\hbar l}{m}|C|^2 = \frac{\hbar l}{m}\left(\frac{2k}{k+l}\right)^2|A|^2.$$

Zavedeme a dopočítáme nyní koeficient odrazu R a koeficient průchodu T vyjadřující pravděpodobnost odrazu/průchodu částice:

$$R \stackrel{\text{def}}{=} \frac{|j_R|}{|j_I|} = \frac{\frac{\hbar k}{m}|B|^2}{\frac{\hbar k}{m}|A|^2} = \frac{\frac{\hbar k}{m}\left(\frac{k-l}{k+l}\right)^2|A|^2}{\frac{\hbar k}{m}|A|^2} = \left(\frac{k-l}{k+l}\right)^2 = \left(\frac{\sqrt{E}-\sqrt{E-V_S}}{\sqrt{E}+\sqrt{E-V_S}}\right)^2,$$



Obrázek 3.7: Závislost koeficientů R a T na poměru $\frac{E}{V_S}$ pro potenciálový schod.

$$T \overset{\text{def}}{=} \frac{|j_T|}{|j_I|} = \frac{\frac{\hbar l}{m}|C|^2}{\frac{\hbar k}{m}|A|^2} = \frac{\frac{\hbar l}{m}\left(\frac{2k}{k+l}\right)^2|A|^2}{\frac{\hbar k}{m}|A|^2} = \frac{4kl}{(k+l)^2} = \frac{4\sqrt{E(E-V_S)}}{\left(\sqrt{E}+\sqrt{E-V_S}\right)^2}.$$

Snadno lze ověřit, že platí $R + T = 1$, což znamená, že částice se nutně buď odrazí, nebo projde, není jiná možnost. Dále je dobře patrné, že koeficient $R \neq 0$, přestože $E > V$. Částice se tedy může od schodu odrazit i přesto, že má dostatečnou energii k jeho překonání, což je efekt, který nemá v klasické mechanice obdobu. Pravděpodobnost odrazu ovšem s rostoucí energií E částice rychle klesá; závislost R a T na poměru $\frac{E}{V}$ ukazuje graf na obr. 3.7.

Z právě provedeného výpočtu nám nevyplynuly žádné podmínky na povolené hodnoty energie (tj. neobjevilo se kvantování energie) – energie E tedy může nabývat libovolných hodnot $E > V$. Takovéto stavy, kdy energie není kvantována a vlnová funkce je nenulová na neomezeném intervalu, nazýváme **rozptylové stavy**.

Úkol 3.6 Na výše uvažovaný potenciálový schod nalétávají zleva částice hmotnosti m. Jaká část se jich od potenciálového schodu odrazí, je-li energie těchto částic $E = \frac{4}{3}V_S$? Výsledek výpočtu zkontrolujte pohledem do grafu na obr. 3.7.

Výpočtová úloha 3.1
Svazek elektronů s kinetickou energií 80 eV prolétává z uzemněné kovové trubice do trubice s elektrickým potenciálem 50 V. Tuto situaci budeme modelovat jako přechod přes potenciálový schod.

a) Jaká část elektronů se odrazí zpět?

b) Jaká část by se odrazila zpět, pokud by potenciál druhé trubice byl −50 V?

Nápověda: Oblast s elektrickým potenciálem 50 V představuje pro elektron schod potenciální energie o výšce 50 eV. Pro potenciál −50 V jde pak o stejně vysoký schod, ale směrem dolů.

Výsledky: a) Přibližně 5,8 %. b) Přibližně 1,5 %.

Povšimněte si, že část elektronů se odráží dokonce i v druhém případě, kdy je „schod“ směrem dolů.

Řešení pro $0 < E < V_S$

Situace je zachycena na obr. 3.5 vpravo. V klasickém případě by částice přilétávající zleva k potenciálovému schodu neměla dostatek energie na jeho překonání a odrazila by se zpět.

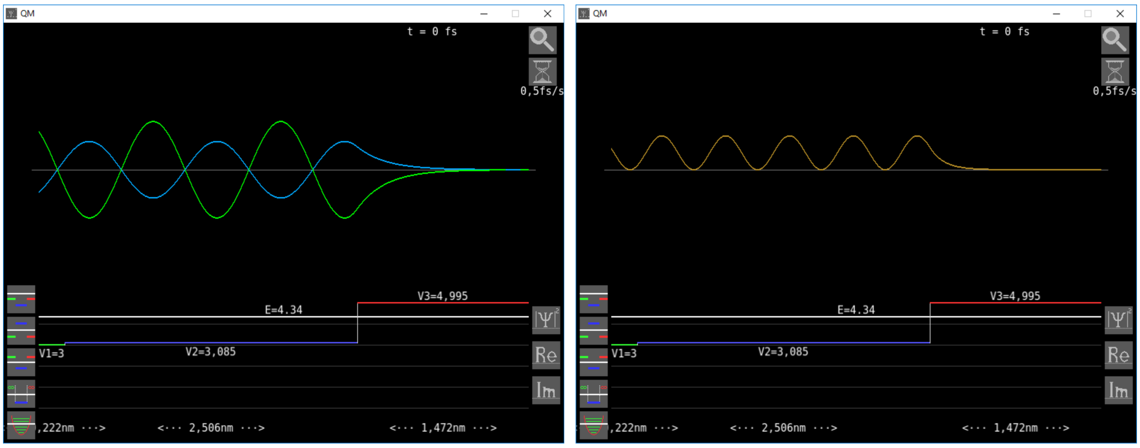
Nespojitost potenciální energie v bodě $x = 0$ opět rozděluje problém na dva intervaly, na kterých najdeme řešení srovnáním s rovnicí 3.3:

- pro $x < 0$: $\psi = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$, kde $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$
- pro $x > 0$: $\psi = C\mathrm{e}^{\alpha x} + D\mathrm{e}^{-\alpha x}$, kde $\alpha = \sqrt{\frac{2m|E-V_S|}{\hbar^2}}$

Protože člen $Ce^{\alpha x}$ diverguje pro $x \to +\infty$, což neumožňuje tuto vlnovou funkci v oblasti $x > 0$ normovat, je nutné[6] položit $C = 0$.

Sešívací podmínky kladené na získané vlnové funkce pak nabývají podobu:
• Požadavek spojitosti v $x = 0$: $A + B = D$,
• Požadavek hladkosti v $x = 0$: $\mathrm{i}kA - \mathrm{i}kB = -\alpha D$.

[6] Uvědomte si, že důvod, proč klademe jednu z integračních konstant rovnu nule, je teď zcela odlišný v porovnání s důvodem použitým v předchozí části.



Obrázek 3.8: Vlnová funkce pro potenciálový schod v případě, že $E < V_S$ – vlevo její reálná (zeleně) a imaginární (modře) část, vpravo hustota pravděpodobnosti nalezení částice

Tuto soustavu dvou rovnic o třech neznámých vyřešíme podobně jako v předchozí části tak, že koeficienty B a D vyjádříme pomocí koeficientu A:

$$B = \frac{\mathrm{i}k + \alpha}{\mathrm{i}k - \alpha} A, \qquad D = \frac{2\mathrm{i}k}{\mathrm{i}k - \alpha} A \tag{3.6}$$

Než se pustíme do výpočtu koeficientu R a T, opět si spočteme příslušné hustoty toku pravděpodobnosti. Řešení v levé části má stejný tvar, proto i hustoty toků pravděpodobnosti pro oba členy budou stejné (jiný je jen vztah mezi koeficienty B a A). V pravé části, tj. v oblasti odpovídající částicím prošlým přes schod ($x > 0$) máme reálnou vlnovou funkci, takže víme, že z ní spočítaná hustota toku bude nulová, což lze snadno ověřit výpočtem:

$$j_T = \frac{\hbar}{2\mathrm{i}m} \left(D^* \mathrm{e}^{-\alpha x} \frac{\partial D \mathrm{e}^{-\alpha x}}{\partial x} - D \mathrm{e}^{-\alpha x} \frac{\partial D^* \mathrm{e}^{-\alpha x}}{\partial x} \right) = 0.$$

Díky tomu můžeme podobně jako v předcházející podkapitole stanovit koeficienty odrazu a průchodu R a T:

$$R = \frac{\frac{\hbar k}{m} |B|^2}{\frac{\hbar k}{m} |A|^2} = \left| \frac{\mathrm{i}k + \alpha}{\mathrm{i}k - \alpha} \right|^2 = 1$$

$$T = \frac{|j_T|}{|j_I|} = 0$$

Je tedy patrné, že ve shodě s klasickou fyzikou se všechny nalétávající částice s $0 < E < V_S$ od potenciálového schodu odrazí.

Ačkoliv je koeficient průchodu $T = 0$, je vlnová funkce a tedy i hustota pravděpodobnosti nalezení částice nenulová i v oblasti $x > 0$, tedy v oblasti, která je v klasické fyzice pro částici nedosažitelná. Hustota pravděpodobnosti nalezení částice v této oblasti klesá exponenciálně jako $e^{-2\alpha x}$. Příčinou je náš požadavek na spojitost a hladkost napojení řešení Schrödingerovy rovnice v obou oblastech. Vidíme tedy, že i řešení případu, který je klasicky nefyzikální, zde našlo uplatnění.

Ani v tomto výpočtu jsme nedostali žádné podmínky na kvantování energie. Jedná se opět o úlohy rozptylového typu.

Existuje řešení pro $E < 0$?

Když už nám v předchozím případě vyšlo, že částici lze nalézt v „klasicky nedosažitelné“ oblasti, ve které je její celková energie E menší než hodnota potenciální energie v tomto místě, může to vést k myšlence, že možné je vše. Zkusme se formálně podívat na to, co dostaneme, pokud budeme řešit potenciálový schod pro energii $E < 0$, tj. celková energie je všude jistě menší než potenciální. Řešení se opět rozpadá na dva intervaly:

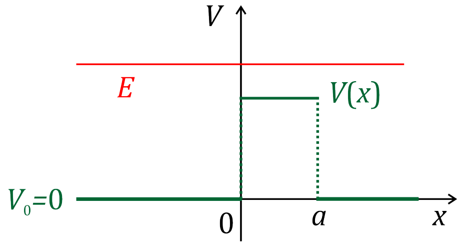
- pro $x < 0$: $\psi = A\mathrm{e}^{\alpha x} + B\mathrm{e}^{-\alpha x}$, kde $\alpha = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$,
- pro $x > 0$: $\psi = C\mathrm{e}^{\beta x} + D\mathrm{e}^{-\beta x}$, kde $\beta = \sqrt{\frac{2m(|E|+V)|}{\hbar^2}}$.

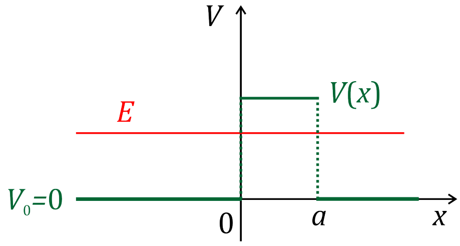
Protože potřebujeme vlnovou funkci normovatelnou, tak je nutné, aby ani v jedné části nedivergovala, tj. nutně musí platit $B = C = 0$.

Podmínky spojitosti potom jsou: $A = D$ a $\alpha A = -\beta D$, což nelze splnit. Tato úloha tedy nemá žádné řešení, které by bylo spojité a hladké.

Výpočtová úloha 3.2
Spočtěte, jak bude vypadat řešení pro opačně orientovaný potenciálový schod, tj. uvažujte $V(x) > 0$ pro $x < 0$ a $V(x) = V_0 = 0$ pro $x > 0$. Dále určete koeficienty odrazu R a průchodu T.

Výsledkem předchozí úlohy je, že i v případě, kdy částice přilétávají ke schodu, kde potenciální energie poklesne, mohou se s nenulovou pravděpodobností odrážet. Tento jev v klasické mechanice nenalezneme, zde by částice prošla rozhraním a zvýšila svoji rychlost.





Obrázek 3.9: Vlevo situace pro $E > V_B$, vpravo pro $0 < E < V_B$

3.5 Potenciálová bariéra a tunelový jev

Velmi podobným postupem, jaký jsme použili v předcházející kapitole, nyní vyšetříme potenciálovou bariéru o výšce V_B a šířce a. Body nespojitosti potenciální energie budeme uvažovat v bodech $x = 0$ a $x = a$. Řešení opět rozdělíme na dva případy[7] podle toho, zda je celková energie E částice větší či menší než výška bariéry V_B.

Řešení pro $E > V_B$

Situace je zachycena na obr. 3.9 vlevo. Řešení stacionární Schrödingerovy rovnice budeme hledat na třech intervalech, a získáme ho v tomto tvaru:

- Pro $x < 0$: $\psi = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$, kde $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$
- Pro $0 < x < a$: $\psi = C\mathrm{e}^{\mathrm{i}lx} + D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}lx}$, kde $l = \sqrt{\frac{2m(E-V_B)}{\hbar^2}}$
- Pro $x > a$: $\psi = F\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + G\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$, kde $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

Protože budeme řešit stejnou situaci jako v případě potenciálového schodu, člen $G\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$ by opět v klasické analogii odpovídal částici přicházející zprava v oblasti $x > a$, které v našem uspořádání neuvažujeme, proto položíme $G = 0$. Sešívací podmínky je třeba uvažovat v bodech $x = 0$ i $x = a$:

Pro $x = 0$:

$$A + B = C + D$$

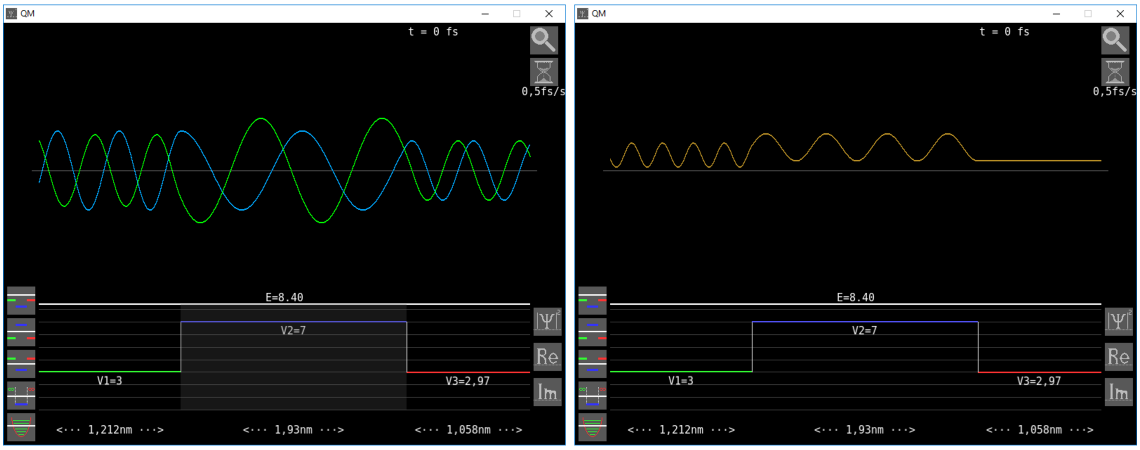
$$\mathrm{i}kA - \mathrm{i}kB = \mathrm{i}lC - \mathrm{i}lD$$

Pro $x = a$:

$$Ce^{\mathrm{i}la} + De^{-\mathrm{i}la} = Fe^{\mathrm{i}ka}$$

$$\mathrm{i}lC\mathrm{e}^{\mathrm{i}la} - ilD\mathrm{e}^{-\mathrm{i}la} = \mathrm{i}kF\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}$$

[7] Případ, kdy je energie $E < 0$, již znovu vyšetřovat nebudeme, opět bychom zjistili, že nedává žádné řešení.



Obrázek 3.10: Vlnová funkce pro potenciálovou bariéru v případě, že $E > V_B$ – vlevo její reálná (zeleně) a imaginární (modře) část, vpravo hustota pravděpodobnosti nalezení částice

Dostali jsme soustavu čtyř rovnic o pěti neznámých,[8] která nám umožňuje například vyjádřit konstanty A až D pomocí konstanty F. Výpočet není náročný, jen je trochu zdlouhavý:

$$A = \frac{(k+l)^2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}la} - (k-l)^2\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}la}}{4lk} \mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\, F \qquad C = \frac{l+k}{2l}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k-l)a}\, F$$

$$B = \frac{2\mathrm{i}\sin(al)(l^2-k^2)}{4lk}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\, F \qquad D = \frac{l-k}{2l}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k+l)a}\, F$$

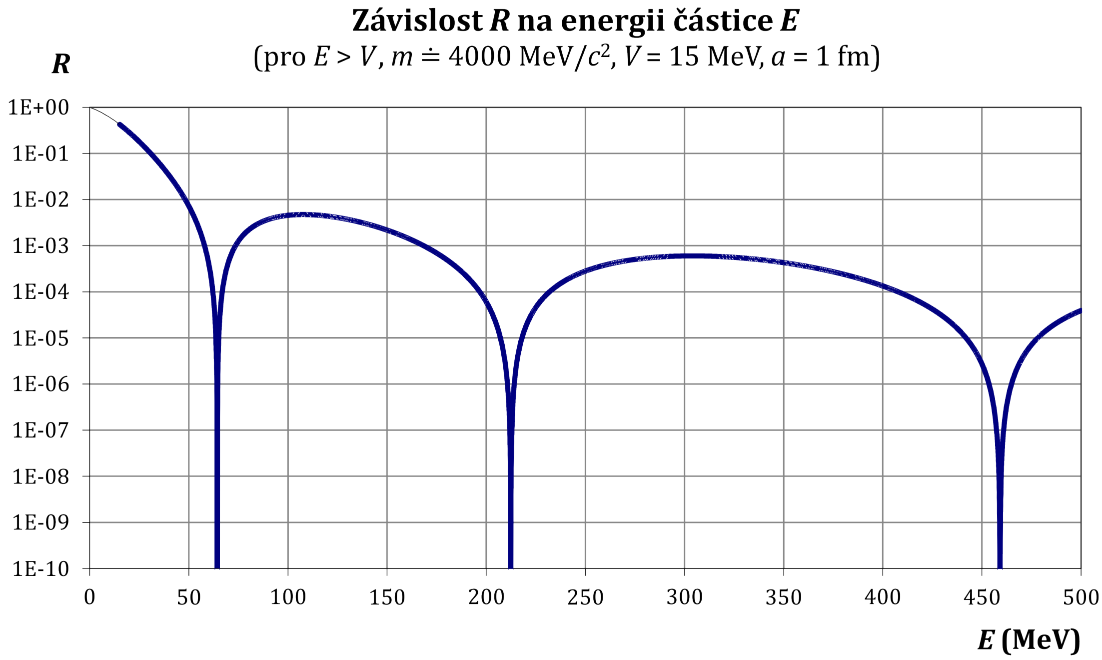
Vlnová funkce tak obsahuje pouze integrační konstantu F, jejíž hodnotu můžeme určit pomocí normovací podmínky. Její průběh zachycuje obrázek 3.10. Povšimněte si odlišné vlnové délky v místech s odlišnou potenciální energií. V levé a prostřední části se skládají vlny opačného směru a proto zde má hustota pravděpodobnosti tvar podobný stojatému vlnění. V pravé části je vlnová funkce rovna jediné rovinné vlně, a proto je zde hustota pravděpodobnosti konstantní.

Obvyklým způsobem určíme koeficient odrazu R:

$$R = \frac{|j_R|}{|j_I|} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \ldots = \frac{V_B^2 \sin^2(la)}{4E(E-V_B) + V_B^2 \sin^2(la)}. \tag{3.7}$$

Koeficient průchodu T je roven pravděpodobnosti, že částici nalezneme v oblasti $x > a$, hustota toku pravděpodobnosti j_T se tedy bude počítat z členu $F\mathrm{e}^{\mathrm{i}kl}$ (lze také použít

[8] Při bližším pohledu zjistíme, že se vlastně jedná o dvě soustavy dvou rovnic, takže její vyřešení není až tak obtížné.



Obrázek 3.11: Závislost koeficientu odrazu R na celkové energii částice E pro $E > V_B$. (Minima v grafu dosahují nulových hodnot, což ovšem logaritmická škála svislé osy neumožňuje zobrazit.)

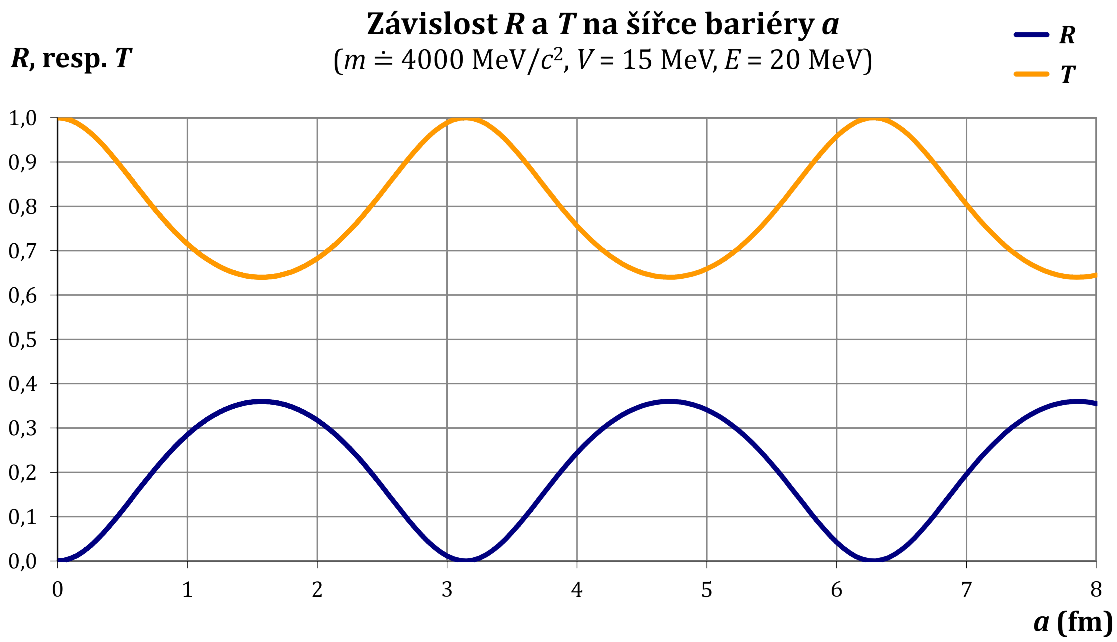
jednodušší postup a pravděpodobnost průchodu spočítat jako $T = 1 - R$):

$$T = \frac{|j_T|}{|j_I|} = \frac{|F|^2}{|A|^2} = ... = \frac{4E(E{-}V_B)}{4E(E{-}V_B) + V_B^2 \sin^2{(la)}}.$$

Závislost velikosti koeficientu R na energii částice zachycuje obrázek 3.11.

Evidentně dostáváme výsledek, který je odlišný od klasické fyziky – koeficient R je obecně nenulový, tj. podobně jako u potenciálového schodu se může nalétávající částice odrazit, přestože má energii dostatečnou k překonání bariéry.

Překvapivě může působit skutečnost, že koeficienty R a T mají periodický průběh (perioda je rovna la); jejich průběh v závislosti na šířce bariéry a při pevné energii E ukazuje obr. 3.12. Z výrazu 3.7 je patrné, že pro $la = n\pi$, kde n je přirozené číslo, je $R = 0$. Jinými slovy, pro danou šířku bariéry a nedochází při vhodných energiích částic E (připomeňme, že energie E vystupuje ve výrazu pro l) k jejich odrazu. Tyto energie se nazývají rezonanční.



Obrázek 3.12: Závislost koeficientů odrazu R a průchodu T na šířce bariéry a v případě, že $E > V_B$

Řešení bariéry pro $0 < E < V_B$

Situace je zachycena na obr. 3.9 vpravo. Řešení stacionární Schrödingerovy rovnice na intervalech $x < 0$ a $x > a$ jsou stejná jako v předchozím případě $E > V_B$. V intervalu $0 < x < a$ jsou pak řešením reálné exponenciály: $\psi = C\mathrm{e}^{\alpha x} + D\mathrm{e}^{-\alpha x}$, $\alpha = \sqrt{\frac{2m|E-V_B|}{\hbar^2}}$. Protože je interval omezený, není ani jedna z reálných exponenciál divergující a přípustná jsou obě řešení.

Po položení $G = 0$ ze stejných důvodů jako v předešlé části dostáváme sešívací podmínky ve tvaru:

Pro $x = 0$:

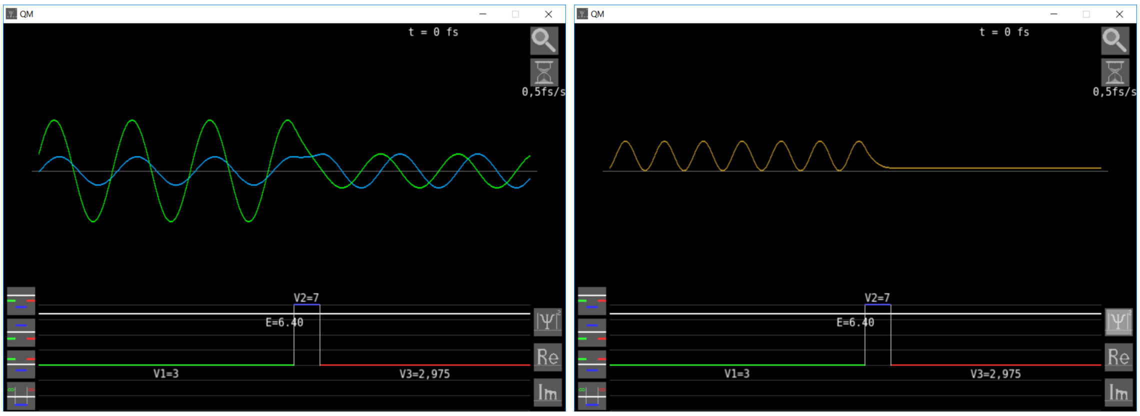
$$A + B = C + D$$

$$\mathrm{i}kA - \mathrm{i}kB = \alpha C - \alpha D$$

Pro $x = a$:

$$C\mathrm{e}^{\alpha a} + D\mathrm{e}^{-\alpha a} = F\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}$$

$$\alpha C\mathrm{e}^{\alpha a} - \alpha D\mathrm{e}^{-\alpha a} = \mathrm{i}kF\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}$$



Obrázek 3.13: Vlnová funkce pro potenciálovou bariéru v případě, že $0 < E < V_B$ – vlevo její reálná (zeleně) a imaginární (modře) část, vpravo hustota pravděpodobnosti nalezení částice

Podobně jako v předcházející podkapitole[9] lze tuto soustavu čtyř rovnic o pěti neznámých vyřešit tak, že integrační konstanty A až D vyjádříme pomocí F a určíme koeficient odrazu R a průchodu T

$$R = \frac{|j_R|}{|j_I|} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \ldots = \frac{V_B^2 \sinh^2(\alpha a)}{4E|E - V_B| + V_B^2 \sinh^2(\alpha a)}, \tag{3.8}$$

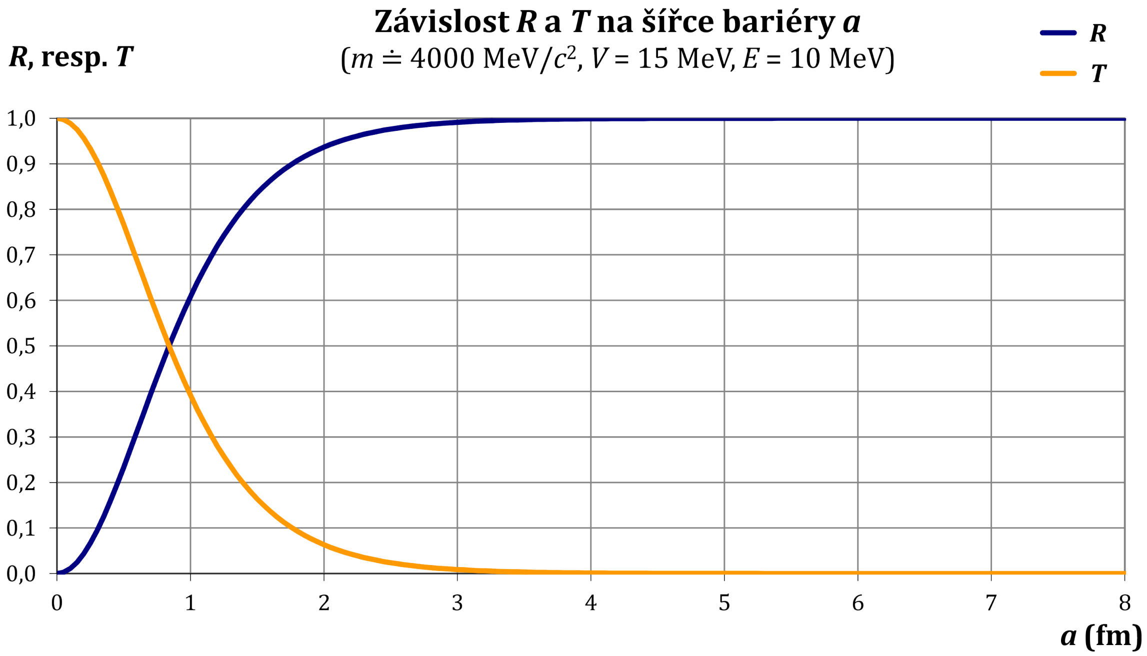
$$T = \frac{|j_T|}{|j_I|} = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \ldots = \frac{4E|E - V_B|}{4E|E - V_B| + V_B^2 \sinh^2(\alpha a)}. \tag{3.9}$$

Na obr. 3.13 je zachycen průběh vlnové funkce a hustoty pravděpodobnosti v tomto případě. Povšimněte si, že vlnová funkce a zejména hustota pravděpodobnosti exponenciálně klesají v místech bariéry, ale protože bariéra není příliš široká, není pokles dostatečný, a proto je vpravo od bariéry hustota pravděpodobnosti stále poměrně vysoká. Graf na obr. 3.14 ukazuje závislost R a T na šířce bariéry a pro α částici s klidovou hmotností přibližně 4000 MeV$/c^2$; uvažujeme přitom „výšku“ potenciálové bariéry $V = 15\,\mathrm{MeV}$ a celkovou energii částice $E = 10\,\mathrm{MeV}$. Výška bariéry odpovídá potenciálové bariéře, kterou musí alfa částice překonat na okraji jádra při alfa rozpadu. Průběh závislosti obou koeficientů je ale obdobný i pro jiné situace.

Pravděpodobnost průchodu T s tloušťkou bariéry klesá přibližně exponenciálně k nule, ale není nulová – při $\alpha a \gg 1$:

$$T \approx \frac{4E|E - V_B|}{V_B^2} e^{-2\alpha a}.$$

[9] Samozřejmě lze tento případ vyřešit samostatně. Je ale možné převzít řešení z předchozí části, pokud si uvědomíme, že sešívací podmínky se liší jen substitucí $il = \alpha$.



Obrázek 3.14: Koeficienty odrazu R a průchodu T v závislosti na šířce bariéry a pro případ $0 < E < V_B$

To znamená, že za potenciálovou bariéru mohou pronikat i částice, které nemají dostatečnou energii ($E < V_B$) a podle klasické teorie by se měly vždy odrazit zpět. Tento efekt označujeme v kvantové fyzice jako tzv. **tunelový jev**.

Tunelový jev umožnil v historii vysvětlit, proč se některé prvky rozpadají α rozpadem během několika μs, zatímco jiným může stejný rozpad trvat miliardy let. Právě exponenciální závislost pravděpodobnosti průchodu bariérou (exponenciála je ve vztahu 3.9 „schována“ v hyperbolickém sinu) vede – i přes nepříliš velké odlišnosti v parametrech (tloušťce a výšce) potenciálové bariéry na okraji různých atomových jader – k velmi rozdílným pravděpodobnostem průchodu alfa částice touto bariérou, a tedy i k velmi rozdílným poločasům rozpadu (hodnoty se liší o 20 řádů a více).

Přímou technologickou aplikací tunelového jevu je fungování *rastrovacího tunelového mikroskopu* (scanning tunneling microscopy – STM). Na jednoatomový hrot sondy mikroskopu, který se pohybuje nad zkoumaným vzorkem v obvyklé vzdálenosti $4-7{\cdot}10^{-10}$ m, je přiváděno elektrické napětí. Mezera mezi hrotem a vzorkem představuje potenciálovou bariéru, kterou mohou elektrony ze vzorku překonávat díky tunelovému jevu a přecházet do hrotu (nebo naopak) – vzniká tak tzv. tunelovací proud. Tunelovací proud velmi silně závisí na vzdálenosti hrotu od vzorku, tj. šířce potenciálové bariéry. Vzdálenost hrotu a vzorku je pomocí piezokrystalů velmi přesně nastavována tak, aby tunelovací proud zůstával konstantní a dal nám informaci o struktuře povrchu zkoumaného vzorku (a to až do rozlišení na úrovni polohy či velikosti jednotlivých atomů).

Úkol 3.7 Odhadněte pomocí průchodu jednodimenzionální potenciálovou bariérou pravděpodobnost α rozpadu, jestliže při něm α částice s kinetickou energií $E = 5$ MeV musí pro opuštění jádra překonat potenciálovou bariéru výšky $V_B = 15$ MeV a šířky 0,5 fm.

Poznámka: $c\hbar \doteq 200\,\mathrm{MeV\,fm}$.

Úkol 3.8 Určete pravděpodobnost, že míč o hmotnosti 1 kg a rychlosti 1 m/s projde centimetrovou zdí, na jejíž „proražení“ by potřeboval energii 1 J (tj. dvojnásobnou, než odpovídá jeho kinetické energii).

3.6 Pravoúhlá konečně hluboká potenciálová jáma

Nyní budeme zkoumat tzv. pravoúhlou konečně hlubokou potenciálovou jámu šířky a a hloubky $-V_J$, průběh potenciální energie je zachycen na obrázku 3.15.

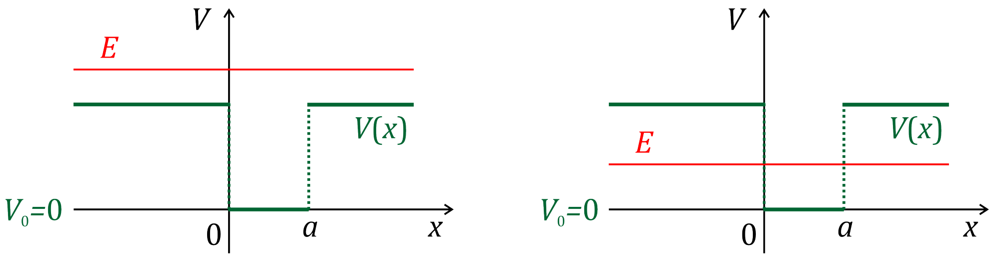
Řešení pro $E > 0$

Situace na obr. 3.15 vlevo se od pro $E > V_B$ v podstatě neliší potenciálové bariéry[10], budeme se jí tedy věnovat pouze velmi stručně. Řešení stacionární Schrödingerovy rovnice jsou

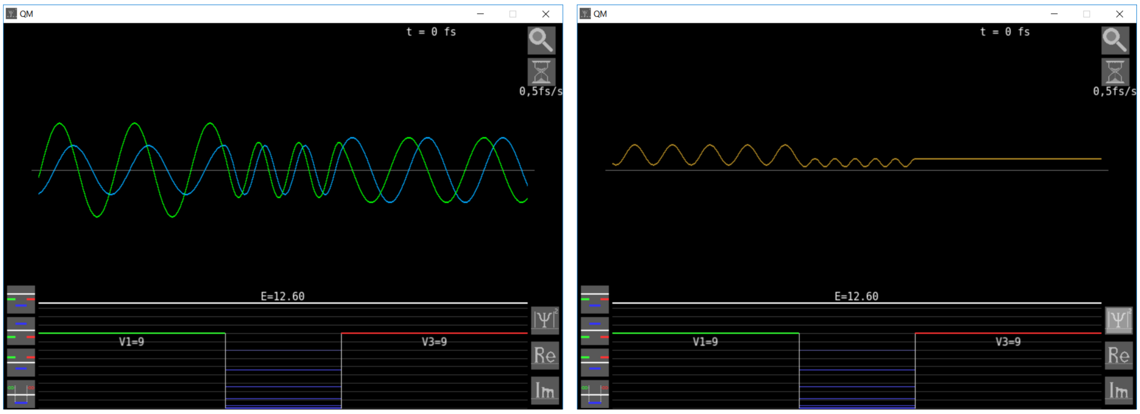
- pro $x < 0$: $\psi = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$, kde $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$,
- pro $0 < x < a$: $\psi = C\mathrm{e}^{\mathrm{i}lx} + D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}lx}$, kde $l = \sqrt{\frac{2m(E+|V_J|)}{\hbar^2}}$,
- pro $x > a$: $\psi = F\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + G\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$, kde $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$.

Stejně jako v případě bariéry nebudeme uvažovat člen, který by v klasické analogii odpovídal částici pohybující se v oblasti $x > a$ směrem doleva, tedy položíme $G = 0$. Vyřešením soustavy rovnic, které nám daly sešívací podmínky, můžeme stanovit koeficienty R a T. Asi nás nepřekvapí, že stejně jako u potenciálového schodu či bariéry může docházet k odrazu, i když částice mají dostatečnou energii na průchod. Vlnová funkce a hustota pravděpodobnosti jsou zachyceny na obrázku 3.16. Porovnejte ho s průběhem těchto funkcí pro potenciálovou bariéru na obr. 3.10.

[10] Ve skutečnosti stačí v řešení pro $E > V_B$ nahradit výšku bariéry V_B její zápornou hodnotou a veškeré výsledky zůstanou v platnosti.



Obrázek 3.15: Vlevo situace pro $E > V_J$, vpravo pro $E < V_J$



Obrázek 3.16: Vlnová funkce pro konečně hlubokou pravoúhlou potenciálovou jámu v případě, že $E > 0$ – vlevo její reálná (zeleně) a imaginární (modře) část, vpravo hustota pravděpodobnosti nalezení částice

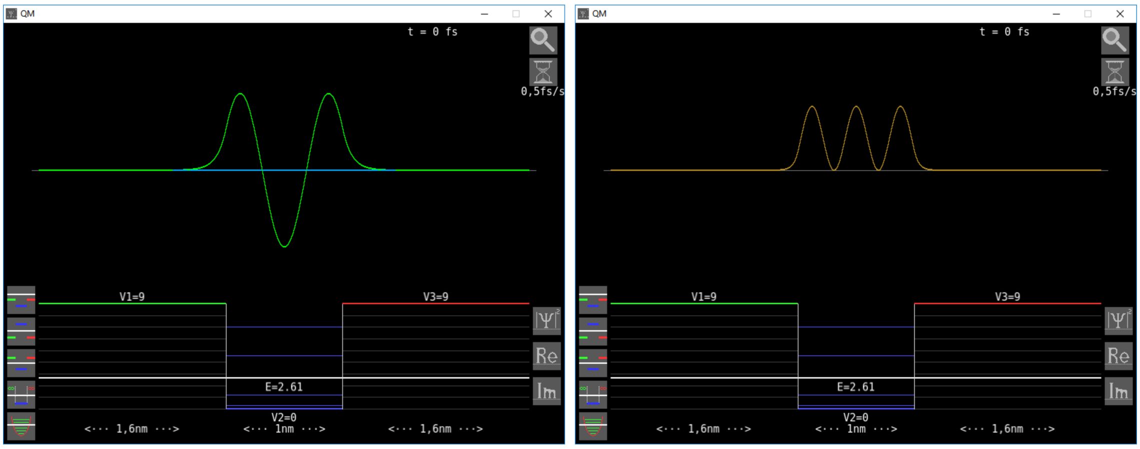
Řešení pro $-V_J < E < 0$

Nyní se budeme věnovat částici vázané v konečně hluboké potenciálové jámě – situaci zachycené na obr. 3.15 vpravo. Tento případ se liší tím, že v krajních neomezených intervalech je potenciální energie V větší než celková energie částice. Uvědomme si ještě před začátkem řešení, že v klasickém případě by se částice rovnoměrně pohybovala v intervalu $0 < x < a$, tj. uvnitř jámy, a pružně se odrážela od stěn jámy.

Řešení stacionární Schrödingerovy rovnice zde dostává podobu:

- pro $x < 0$: $\psi = A\mathrm{e}^{\alpha x} + B\mathrm{e}^{-\alpha x}$, kde $\alpha = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$,
- pro $0 < x < a$: $\psi = C\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$, kde $k = \sqrt{\frac{2m(|V_J|-|E|)}{\hbar^2}}$,
- pro $x > a$: $\psi = F\mathrm{e}^{\alpha x} + G\mathrm{e}^{-\alpha x}$, kde $\alpha = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$.

Protože požadujeme, aby byla výsledná vlnová funkce normovatelná, musíme z nalezeného řešení vyškrtnout členy, které by v $x \to \pm\infty$ divergovaly – proto je nezbytné, aby $B = F = 0$. Sešívací podmínky tím dostávají tvar:



Obrázek 3.17: Vlevo vlnová funkce pro konečně hlubokou pravoúhlou potenciálovou jámu v případě, že $-V_J < E < 0$ (reálná část je zeleně a imaginární část vlnové funkce je nulová), vpravo hustota pravděpodobnosti nalezení částice

Pro $x = 0$:

$$A = C + D$$

$$\alpha A = \mathrm{i}kC - \mathrm{i}kD$$

Pro $x = a$:

$$C\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} + D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka} = G\mathrm{e}^{-\alpha a}$$

$$\mathrm{i}kC\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} - \mathrm{i}kD\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka} = -\alpha G\mathrm{e}^{-\alpha a}$$

Dostali jsme tedy homogenní soustavu čtyř lineárních rovnic o čtyřech neznámých. Tato soustava má netriviální řešení právě tehdy, když je matice soustavy singulární, tj. determinant matice je nulový. Tato situace ovšem zjevně nastane pouze pro některé hodnoty k a α, tj. pouze pro některé hodnoty celkové energie E. Jako důsledek požadavku na spojitost, hladkost a normovatelnost vlnové funkce tedy dostáváme kvantování energie. Dále je v těchto stavech pravděpodobnost nalezení částice nenulová jen v oblasti jámy a jejím nejbližším okolí (mimo oblast jámy, tj. mimo oblast $0 < x < a$ exponenciálně klesá) – mluvíme o tom, že výskyt částice je „vázán na jámu“ a hovoříme o tzv. **vázaných stavech**. Jedno z těchto řešení je zachyceno na obr. 3.17.

Matici soustavy M upravíme tak, aby se nám lépe počítal determinant

$$M = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ \alpha & -\mathrm{i}k & \mathrm{i}k & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka} & -\mathrm{e}^{-\alpha a} \\ 0 & \mathrm{i}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} & -\mathrm{i}k\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka} & \alpha\mathrm{e}^{-\alpha a} \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & -\mathrm{i}k+\alpha & \mathrm{i}k+\alpha & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka} & -\mathrm{e}^{-\alpha a} \\ 0 & \mathrm{i}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} & -\mathrm{i}k\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka} & \alpha\mathrm{e}^{-\alpha a} \end{pmatrix} \sim$$

$$\sim \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & \alpha-\mathrm{i}k & \alpha+\mathrm{i}k & 0 \\ 0 & (\alpha+\mathrm{i}k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} & (\alpha-\mathrm{i}k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka} & -\mathrm{e}^{-\alpha a} \end{pmatrix}.$$

Spočítáme determinant

$$\mathrm{Det}\, M = -\mathrm{e}^{-\alpha a}\left[(\alpha - \mathrm{i}k)^2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka} - (\alpha + \mathrm{i}k)^2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\right] = 0,$$

což lze upravit na součin

$$\left[(\alpha - \mathrm{i}k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka/2} - (\alpha + \mathrm{i}k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka/2}\right]\left[(\alpha - \mathrm{i}k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka/2} + (\alpha + \mathrm{i}k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka/2}\right] = 0$$

a dále

$$\left[\alpha \sin\left(\frac{ka}{2}\right) + k\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\right]\left[\alpha \cos\left(\frac{ka}{2}\right) - k\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right] = 0.$$

Dostáváme dvě rovnice

$$-\cot\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{\alpha}{k}. \qquad \text{nebo} \qquad \tan\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{\alpha}{k} \tag{3.10}$$

Oba parametry k i α závisejí na hledané energii E

$$k = \sqrt{\frac{2m(|V_J| - |E|)}{\hbar^2}} \quad \text{a} \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}},$$

takže výrazy na pravé straně obou rovnic můžeme upravit na tvar

$$\frac{\alpha}{k} = \frac{1}{k}\sqrt{\frac{2m|V_J|}{\hbar^2} - k^2}.$$

Teď tedy máme dvě rovnice pro k

$$\tan\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{1}{k}\sqrt{\frac{2m|V_J|}{\hbar^2} - k^2} \qquad \text{nebo} \qquad -\cot\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{1}{k}\sqrt{\frac{2m|V_J|}{\hbar^2} - k^2}. \tag{3.11}$$

Rovnice nejsou řešitelné analyticky, ale lze poměrně jednoduše graficky ukázat, že vždy existuje alespoň jedno řešení (viz obr. 3.18).

Alternativní přístup k případu $-V_J < E < 0$

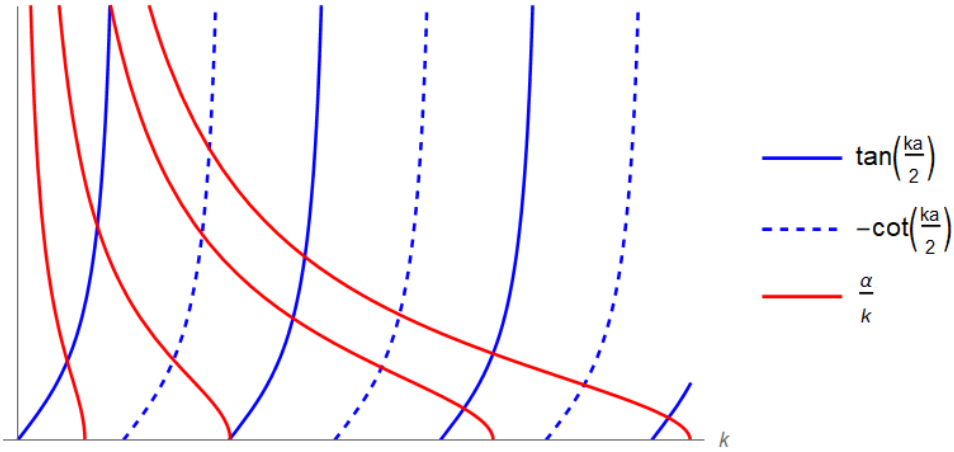
Předchozí případ lze řešit matematicky mírně odlišně. Položíme pouze $F = 0$ a integrační konstantu B ponecháme ve výpočtu. V takovém případě dostaneme sešívací podmínky ve tvaru:

Pro $x = 0$:

$$A + B = C + D$$
$$\alpha A - \alpha B = \mathrm{i}kC - \mathrm{i}kD$$

Pro $x = a$:

$$C\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} + D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka} = G\mathrm{e}^{-\alpha a}$$
$$\mathrm{i}kC\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} - \mathrm{i}kD\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka} = -\alpha G\mathrm{e}^{-\alpha a}$$



Obrázek 3.18: Grafické řešení rovnic 3.11 pro hledání povolených energií v konečné jámě. Modře jsou nakresleny levé strany obou rovnic, červeně společná pravá strana obou rovnic pro různé hodnoty hloubky jámy V_J. Je patrné, že minimálně jeden průsečík, tj. jedno řešení bude existovat pro libovolnou hodnotu V_J.

což jsou 4 rovnice pro pět neznámých integračních konstant, podobně jako v případě potenciálové bariery. Konstantu G můžeme zvolit jako parametr a pomocí ní nejprve vyjádřit C a D použitím podmínek v bodě $x = a$

$$C = \frac{k + \mathrm{i}\alpha}{2k} G\mathrm{e}^{-\alpha a - \mathrm{i}ka}, \quad D = \frac{k - \mathrm{i}\alpha}{2k} G\mathrm{e}^{-\alpha a + \mathrm{i}ka}$$

a potom pomocí G vyjádřit i hodnoty konstant A a B využitím sešívacích podmínek v bodě $x = 0$

$$A = \frac{\alpha + \mathrm{i}k}{2\alpha} C + \frac{\alpha - \mathrm{i}k}{2\alpha} D = -\frac{\mathrm{e}^{-\alpha a}}{4k\alpha}\left[\mathrm{i}(\alpha^2 + k^2)\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\right)\right] G,$$

$$B = \frac{\alpha - \mathrm{i}k}{2\alpha} C + \frac{\alpha + \mathrm{i}k}{2\alpha} D = \frac{\mathrm{e}^{\alpha a}}{4k\alpha}\left[\mathrm{i}(k^2 - \alpha^2)(\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}) + 2\alpha k(\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka})\right] G.$$

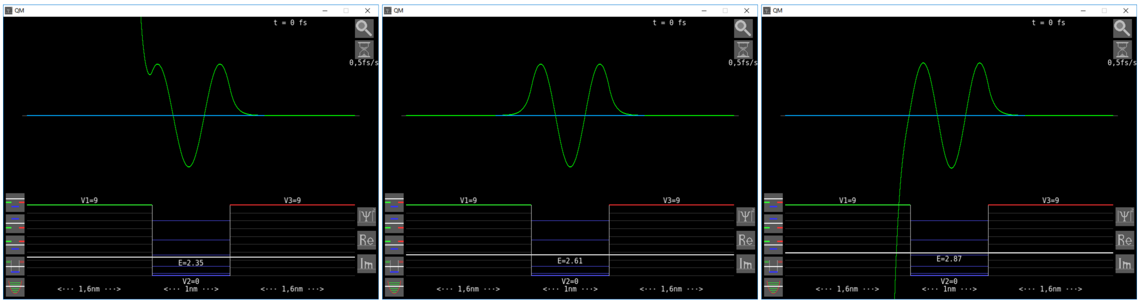
Jsme si ale vědomi, že fyzikálně jsou přípustná pouze ta řešení, kdy nám vyjde $B = 0$. Položením $B = 0$ dostaneme podmínku pro přípustné energie E (ty jsou obsaženy ve vyjádření k a α) a získáme tak kvantování energie.

Pokud položíme $B = 0$, dostaneme rovnici:

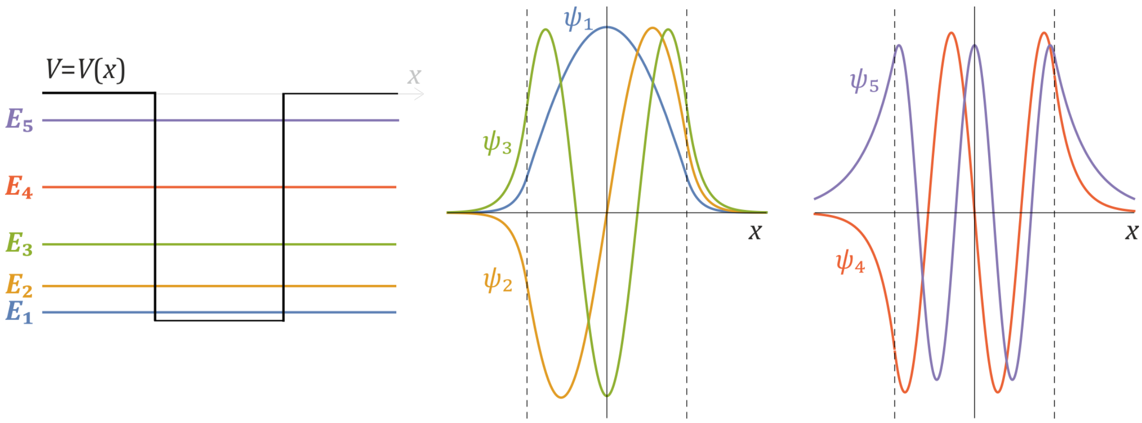
$$B = \frac{\mathrm{e}^{\alpha a - \mathrm{i}ka}}{4k\alpha}\left[2k\alpha(\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ka} + 1) + \mathrm{i}(k^2 - \alpha^2)(\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ka} - 1)\right] G =$$

$$= \frac{\mathrm{i}\mathrm{e}^{\alpha a - \mathrm{i}ka}}{4k\alpha}\left[k\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} - 1\right) - \mathrm{i}\alpha\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} + 1\right)\right]\left[k\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} + 1\right) - \mathrm{i}\alpha\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} - 1\right)\right] G =$$

$$= \frac{\mathrm{i}\mathrm{e}^{\alpha a}}{4k\alpha}\left[k\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka/2} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka/2}\right) - \mathrm{i}\alpha\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka/2} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka/2}\right)\right]$$



Obrázek 3.19: Spojité řešení stacionární Schrödingerovy rovnice pro konečnou jámu pro různé hodnoty B. Vlevo $B > 0$, uprostřed $B = 0$, vpravo $B < 0$. Je patrné, že normovatelná a tedy i fyzikální přípustná jsou řešení s $B = 0$



Obrázek 3.20: Stacionární stavy v konečně hluboké jámě – povolené energie jsou znázorněny vlevo, vlnové funkce uprostřed a vpravo

$$\left[k\left(\mathrm{e}^{ika/2}+\mathrm{e}^{-ika/2}\right)-\mathrm{i}\alpha\left(\mathrm{e}^{ika/2}-\mathrm{e}^{-ika/2}\right)\right]G=0.$$

Výrazy v kulatých závorkách přepíšeme pomocí goniometrických funkcí a dostaneme

$$\left[k\sin\left(\frac{ka}{2}\right)-\alpha\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\right]\left[k\cos\left(\frac{ka}{2}\right)+\alpha\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right]=0,$$

a tím jsme dostali stejné rovnice jako v předchozím případě.

Na obr. 3.20 jsou zachyceny povolené energie (vlevo) a příslušné vlnové funkce pro konkrétní hodnoty parametrů částice a jámy. Povolené energie a vlnové funkce jsou odlišeny indexy, které postupně rostou se vzrůstající energií. Takovému označení jednotlivých řešení říkáme kvantové číslo. Z obrázku jsou patrné některé obecně platné vlastnosti:

- Rozdíly mezi povolenými energiemi vzrůstají s rostoucí energií. Obvykle říkáme, že se zvětšují vzdálenosti mezi povolenými energetickými hladinami.

- Vlnová funkce pro nejnižší povolenou energii je sudá vůči středu jámy. S rostoucím kvantovým číslem se postupně střídají lichá a sudá řešení.
- Počet lokálních extrémů vlnové funkce odpovídá kvantovému číslu.
- Vlnová funkce je nenulová i mimo jámu (rozměry jámy jsou v grafech funkcí naznačeny čárkovanou čárou). To znamená, že částici můžeme najít i v oblastech, ve kterých se v klasickém případě vyskytovat nemůže. Z grafu lze také odhadnout, že pravděpodobnost nalezení částice mimo klasickou oblast roste s rostoucím kvantovým číslem, resp. s tím, jak se celková energie částice přibližuje hodnotě potenciální energii mimo jámu.

3.7 Pravoúhlá nekonečně hluboká potenciálová jáma

Výpočtově nejjednodušší aplikací týkající se systémů s po částech konstantní potenciální energií bude studium nekonečně hluboké pravoúhlé potenciálové jámy o šířce L. Zatímco pro $0 < x < L$ pokládáme $V(x) = 0$, všude mimo tento interval je $V(x) \to +\infty$; jinými slovy, skok potenciální energie v bodech $x = 0$ a $x = L$ je nekonečný (viz obr. 3.21).

Řešení mimo interval (0, L):

Má-li být mimo jámu splněna stacionární Schrödingerova rovnice ve tvaru:

$$\hat{H}\psi = (\hat{T} + \hat{V})\psi = E\psi,$$

je nezbytné, aby zde byla vlnová funkce identicky nulová: $\psi = 0$ (abychom „kompenzovali“ nekonečnost potenciální energie). Tím je nulová také hustota pravděpodobnosti výskytu částice vně jámy – na rozdíl od jámy konečné hloubky, kde se mohla částice vyskytovat i v „klasicky nepřístupné“ oblasti.

Řešení na intervalu (0, L):

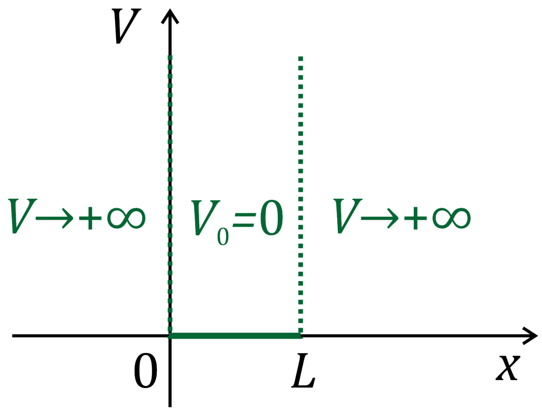
Uvnitř jámy dostáváme pro $V = 0$ rovnici, jejíž řešení jsme již nalezli (vztah 3.3) ve tvaru:

$$\psi = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, \quad \text{kde} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \tag{3.12}$$

Pro nekonečnou jámu bývá zvykem přepisovat tento exponenciální tvar pomocí goniometrických funkcí

$$\psi = C\cos(kx) + D\sin(kx),$$

kde $C = A + B$ a $D = i(A - B)$. Pokud bychom se nyní pokusili napojit tuto vlnovou funkci v bodě $x = 0$ na konstantně nulovou funkci (řešení pro $x < 0$), dostaneme:



Obrázek 3.21: Pravoúhlá nekonečná potenciálová jáma

- Požadavek spojitosti v $x = 0$: $0 = C\cos(0) + D\sin(0) \;\Rightarrow\; 0 = C$,
- Požadavek hladkosti v $x = 0$: $0 = -Ck\sin(0) + Dk\cos(0) \;\Rightarrow\; 0 = Dk$.

Je zřejmé, že tyto dvě rovnice současně splňuje pouze řešení $C = D = 0$, čímž by se ale hledaná vlnová funkce stala identicky nulovou na celém svém definičním oboru, a tedy nenormovatelnou – vlastně bychom ji dále nemohli považovat za vlnovou funkci. Abychom dostali alespoň nějaká řešení, slevíme z obvyklých požadavků na vlnovou funkci a v místech nekonečných skoků potenciální energie budeme vyžadovat pouze její spojitost. Sešívací podmínky tedy dostanou podobu:

- Požadavek spojitosti v $x = 0$: $0 = C\cos(0) + D\sin(0)$,
- Požadavek spojitosti v $x = L$: $0 = C\cos(kL) + D\sin(kL)$.

Z první rovnice přímo dostáváme $C = 0$ a ze druhé rovnice plyne podmínka

$$kL = n\pi, \tag{3.13}$$

kde n je tzv. **kvantové číslo**[11] a z rovnice plyne, že se musí jednat o celé číslo. Pokud si ale uvědomíme, že pro $n = 0$ dostaneme konstantně nulovou funkci a funkce pro n a $-n$ se liší jen znaménkem, vidíme, že všechny fyzikálně přípustné stavy popisují vlnové funkce pro $n = 1,2,3,\ldots$. Nalezená n-tá stacionární funkce má tvar:

$$\psi_n = D\sin(kx) = D\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right). \tag{3.14}$$

Vyjádřením k ze vztahů 3.12 a 3.13 a jejich následným porovnáním dostáváme vztah pro vlastní čísla hamiltoniánu, tj. experimentálně naměřitelné hodnoty celkové energie E pro

[11] Jako kvantové číslo či kvantová čísla budeme označovat jakákoli čísla, která použijeme k „očíslování“ jednotlivých řešení stacionární Schrödingerovy rovnice.

částici v nekonečně hluboké pravoúhlé potenciálové jámě:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{n\pi}{L} \;\Rightarrow\; E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}.$$

Kvantové číslo n použité jako index u energie značí, které stacionární vlnové funkci daná energie přísluší. Vidíme, že důsledkem požadavků na spojitost a normovatelnost vlnové funkce je kvantování energie uvnitř jámy. Povolené energie závisejí kvadraticky na kvantovém čísle, rozdíly mezi energiemi se tedy postupně zvětšují.

Nekonečná jáma jako limita konečné, ale hodně hluboké jámy

Asi netřeba zdůrazňovat, že nekonečný skok je prakticky nerealizovatelný. Tento příklad se tedy dopouští poměrně velkého zjednodušení. Dává ale přijatelně dobré výsledky pro případy, kdy je jáma „velmi hluboká“, resp. zajímáme se pouze o stavy s malými energiemi ve srovnání s potenciální energií mimo jámu.

Přílišné zjednodušení modelu povede i k nutným ústupkům v požadavcích na vlnovou funkci – konkrétně skutečnosti, že nepožadujeme hladkost vlnové funkce v místech s nekonečným skokem potenciální energie, tj. na okrajích jámy. Oprávněnost takového ústupku lze zdůvodnit tím, že i přesto dostaneme řešení, které dobře popisuje případy blížící se zvolenému modelu.

Pokud ale budeme nekonečnou jámu chápat jako limitní případ konečné jámy, které bychom zvětšovali hloubku, a provedeme stejný „limitní přechod“ i ve vlnových funkcích, dostaneme přesně tato řešení, která budou sice spojitá, ale na okrajích jámy nebudou hladká. Pokud budeme uvažovat, že mimo jámu má potenciální energie velikost V a v jámě (tj. pro $0 < x < L$) je nulová, má vlnová funkce pro energie $E < V$ tvar (porovnej se str. 114):

- pro $x < 0$: $\psi = A\mathrm{e}^{\alpha x}$, kde $\alpha = \sqrt{\frac{2m(V-E)}{\hbar^2}}$,
- pro $0 < x < L$: $\psi = C\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$, kde $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$,
- pro $x > L$: $G\mathrm{e}^{-\alpha x}$, kde $\alpha = \sqrt{\frac{2m(V-E)}{\hbar^2}}$.

Pro $V \to \infty$ bude $\alpha \to \infty$ a hodnota vlnové funkce mimo jámu se tedy limitně blíží nule. Rovnice 3.10, které určují povolené energie, se změní na

$$\tan\left(\frac{kL}{2}\right) = \frac{\alpha}{k} = \infty \qquad \text{nebo} \qquad -\cot\left(\frac{kL}{2}\right) = \frac{\alpha}{k} = \infty,$$

takže alespoň jedna rovnice je splněna pokud

$$\frac{kL}{2} = n\,\frac{\pi}{2},$$

což je přesně stejná podmínka, jakou jsme dostali již dříve.

Výpočtová úloha 3.3
Pro nalezené stacionární vlnové funkce

$$\psi_n(x) = D\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \text{ pro } 0 < x < L, \qquad \psi_n(x) = 0 \text{ pro } x < 0 \text{ nebo } L < x$$

určete normovací konstantu D.

Řešení:
Funkci ψ_n dosadíme do normovací podmínky 2.4

$$1 = \int_{\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_n \mathrm{d}x = \int_{\infty}^{0} 0\,\mathrm{d}x + |D|^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\,\mathrm{d}x + \int_L^{\infty} 0\,\mathrm{d}x.$$

Druhou mocninu funkce sinus přepíšeme pomocí dvojnásobného úhlu:

$$1 = \frac{1}{2}|D|^2 \int_0^L \left(1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)\right)\,\mathrm{d}x.$$

Výpočet se tak rozpadá na dva integrály, které snadno vyřešíme:

$$1 = \frac{1}{2}|D|^2 \left(\int_0^L 1\,\mathrm{d}x - \int_0^L \cos\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)\right)\mathrm{d}x = \frac{1}{2}|D|^2\left([x]_0^L - \left[\frac{L}{2n\pi}\sin\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)\right]_0^L\right).$$

Dosazením integračních mezí zjistíme, že druhý člen v závorce je nulový. Vyjádříme D:

$$1 = \frac{1}{2}|D|^2 L \Rightarrow |D| = \sqrt{\frac{2}{L}}.$$

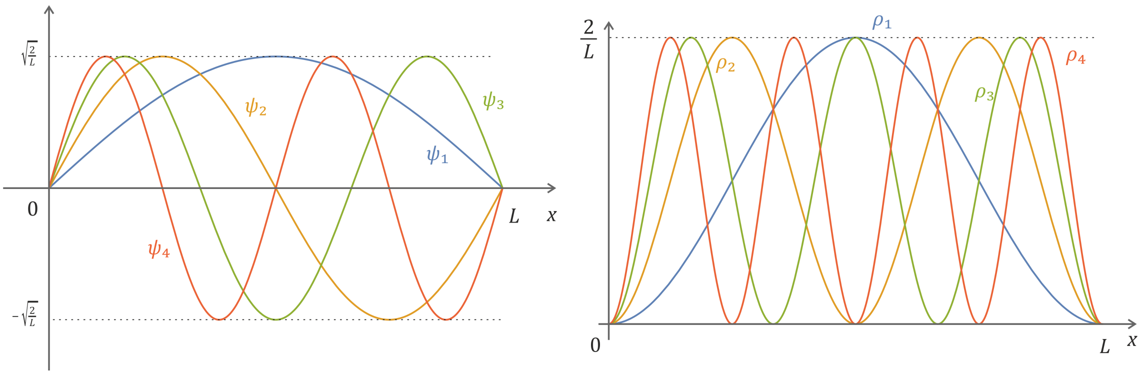
Připomeňme, že integrační konstantou může být v našem případě libovolné komplexní číslo o velikosti $\sqrt{\frac{2}{L}}$, takže přesněji bychom měli výsledek zapisovat ve tvaru

$$D = \sqrt{\frac{2}{L}}e^{i\eta}, \eta \in \mathbb{R}.$$

Se znalostí normovací konstanty tak můžeme zapsat finální podobu stacionárních vlnových funkcí ψ_n částice v nekonečné potenciálové jámě[12] a jejich energií E_n:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \qquad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}. \tag{3.15}$$

[12] Nadále již nebudeme vypisovat, že vlnová funkce je mimo jámu konstantně nulová. Podobně i veškeré integrály při počítání skalárních součinů budeme počítat jen v intervalu $(0,L)$.



Obrázek 3.22: První čtyři řešení stacionární Schrödingerovy rovnice pro tzv. nekonečnou pravoúhlou jámu, vlnové funkce vlevo, hustoty pravděpodobnosti vpravo.

Řešení pro čtyři nejmenší energie jsou znázorněny na obrázku 3.22. Ze vztahu 3.15 a obrázku 3.22 je patrné, že stav s nejnižší ostrou hodnotou energie je sudý vůči středu jámy a pak se střídají liché vlnové funkce (pro sudá n) se sudými vlnovými funkcemi (pro lichá n). Kvantové číslo n odpovídá počtu lokálních extrémů vlnové funkce uvnitř jámy. Tyto vlastnosti jsou tedy obdobné jako u konečně hluboké jámy.

Výpočtová úloha 3.4
Ověřte ortonormalitu báze tvořené vlastními funkcemi ψ_n, kde $n = 0, 1, 2...$

Řešení:
Ověření ortonormality báze provedeme tak, že pro libovolná k, l vypočítáme skalární součin $\langle \psi_k \mid \psi_l \rangle$. Pokud je báze ortonormální, bude tento skalární součin roven jedné pro $k = l$, resp. nule pro $k \neq l$:

$$\langle \psi_k \mid \psi_l \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^* \psi_l \, \mathrm{d}x = \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{k\pi}{L} x\right) \sin\left(\frac{l\pi}{L} x\right) \mathrm{d}x.$$

S pomocí vztahu $\sin(\alpha)\sin(\beta) = \frac{1}{2}\left(\cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)\right)$ pak dostáváme:

$$\langle \psi_k \mid \psi_l \rangle = \frac{1}{L} \int_0^L \left(\cos \frac{(k-l)\pi x}{L} - \cos \frac{(k+l)\pi x}{L} \right) \mathrm{d}x. \tag{3.16}$$

Pro $k = l$ dostáváme integrál 3.16 ve tvaru:

$$\langle \psi_k \mid \psi_l \rangle \stackrel{k=l}{=} \frac{1}{L} \int_0^L 1 \mathrm{d}x + \frac{1}{L} \int_0^L \cos \frac{2k\pi x}{L} \, \mathrm{d}x = \frac{1}{L} [x]_0^L - \frac{1}{L} \left[\frac{L}{2k\pi} \sin \frac{2k\pi x}{L} \right]_0^L = 1.$$

(Druhý integrál dal po dosazení obou mezí nulu, protože v argumentu funkce sinus je násobek π.) Pro $k \neq l$ integrujeme 3.16 takto:

$$\langle \psi_k \mid \psi_l \rangle \overset{k \neq l}{=} \frac{1}{L} \left[\frac{L}{(k-l)\pi} \sin \frac{(k-l)\pi x}{L} - \frac{L}{(k+l)\pi} \sin \frac{(k+l)\pi x}{L} \right]_0^L .$$

Dosazením integračních mezí dostaneme rozdíl dvou členů, které jsou oba nulové (v argumentech funkce sinus se vyskytují celočíselné násobky π):

$$\langle \psi_k \mid \psi_l \rangle \overset{k \neq l}{=} \frac{\sin(\pi(k-l))}{\pi(k-l)} - \frac{\sin(\pi(k+l))}{\pi(k+l)} = 0.$$

Ověřili jsme tedy podmínky ortonormality vlastních funkcí pro nekonečnou potenciálovou jámu.

Úkol 3.9 Napište vlnovou funkci částice v nekonečně hluboké potenciálové jámě, která je v takovém stavu, že pravděpodobnost naměření energie E_1 je $p(E_1) = 50\,\%$, pravděpodobnost naměření energie E_2 je $p(E_2) = 20\,\%$ a energie E_3 je $p(E_3) = 30\,\%$. Je řešení této úlohy jednoznačné?

Úkol 3.10 Napište časový vývoj vlnové funkce pro částici ve stavu ψ_n, tj. ve stacionárním stavu.

Zapište obecné řešení nestacionární (časové) Schrödingerovy rovnice včetně jeho časového vývoje.

Úkol 3.11 Částice v nekonečně hluboké jámě byla v čase $t = 0$ popsána vlnovou funkcí

$$\psi = \sqrt{\frac{1}{L}} \left(\sin \frac{\pi x}{L} + \sin \frac{2\pi x}{L} \right) .$$

Jaké energie mohu v čase $t = 0$ naměřit? Určete i pravděpodobnosti naměření jednotlivých energií.

Určete časový vývoj této vlnové funkce. Spočítejte hustotu pravděpodobnosti nalezení částice v čase $t = 0$ i v nějakém obecném čase $t > 0$. Popište její vývoj v čase.

Jaké energie a s jakou pravděpodobností mohu naměřit v obecném čase $t > 0$?

Výpočtová úloha 3.5
Pro obecnou vlastní funkci ψ_n příslušející částici v nekonečně hluboké potenciálové jámě ověřte relaci neurčitosti.

Nápověda: Nejdříve určete střední hodnoty operátorů $\hat{x}, \widehat{x^2}, \hat{p}, \widehat{p^2}$ ve stacionárním stavu popsaném funkcí ψ_n. Odtud dopočítejte neurčitosti

$$\delta x \overset{\text{def.}}{=} \sqrt{\langle \hat{x}^2\rangle - \langle \hat{x}\rangle^2}, \text{ resp. } \delta p \overset{\text{def.}}{=} \sqrt{\langle \hat{p}^2\rangle - \langle \hat{p}\rangle^2},$$

a porovnejte s Heisenbergovou relací neurčitosti.

Řešení:
Hodnoty potřebných středních hodnot jsou:

$$\langle \hat{x}\rangle_{\psi_n} = \frac{L}{2}, \qquad \langle \widehat{x^2}\rangle_{\psi_n} = L^2\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2n^2\pi^2}\right),$$

$$\langle \hat{p}\rangle_{\psi_n} = 0, \qquad \langle \widehat{p^2}\rangle_{\psi_n} = \frac{\hbar^2 n^2\pi^2}{L^2}.$$

Výpočet relací neurčitosti:

$$\delta x \delta p = L\sqrt{\frac{1}{3} - \frac{1}{2n^2\pi^2} - \frac{1}{4}}\sqrt{\frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{L^2}} \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Úpravou nerovnosti výše dostaneme:

$$n^2\pi^2 \geq 9 \;\Rightarrow\; n \geq \frac{3}{\pi},$$

což je pro $n \geq 1$, které v řešení pro nekonečně hlubokou jámu předpokládáme, splněno vždy.

Výpočtová úloha 3.6
Částice se nachází v nekonečné potenciálové jámě ve stavu popsaném v čase $t = 0$ normovanou vlnovou funkcí

$$\Psi(x) = Nx(L - x).$$

a) Nakreslete průběh uvedené funkce a určete normovací konstantu N.
b) Rozložte vlnovou funkci $\Psi(x)$ na součet vlastních vlnových funkcí.
c) Určete pravděpodobnost, s jakou naměříme ve stavu $\Psi(x)$ energii E_n.
d) Napište časový vývoj Ψ.

Nápověda: Funkce $\Psi(x)$ lze vyjádřit jako lineární kombinaci vlastních funkcí $\psi_n(x)$:

$$\Psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x),$$

kde druhá mocnina velikosti koeficientů c_n odpovídá pravděpodobnosti naměření vlastního čísla E_n. Klíčem k zodpovězení obou otázek je tedy nalezení koeficientů c_n, které s využitím ortonormality báze vlastních funkcí snadno získáme jako:

$$c_n = \langle \Psi \mid \psi_n \rangle .$$

Řešení:
a) $N = \sqrt{\frac{30}{L^5}}$

b) Pro výpočet koeficientů c_n pro rozklad obecné vlnové funkce Ψ do stacionárních stavů využijeme vztah uvedený v nápovědě úlohy:

$$c_n = \langle \Psi \mid \psi_n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \psi_n \mathrm{d}x = \int_0^L \sqrt{\frac{30}{L^5}} x(L-x) \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \mathrm{d}x =$$

$$= \frac{\sqrt{60}}{L^3} \left\{ L \int_0^L x \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \mathrm{d}x - \int_0^L x^2 \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \mathrm{d}x \right\}.$$

Integrály výše vyřešíme (opakovanou) metodou per partes a dostáváme:

$$\int_0^L x \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \mathrm{d}x = -\frac{L^2}{n\pi}(-1)^n,$$

$$\int_0^L x^2 \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \mathrm{d}x = -\frac{L^3}{n\pi}(-1)^n + \frac{2L^3}{n^3\pi^3}\left[(-1)^n - 1\right].$$

Finálními úpravami nakonec získáme:

$$c_n = \frac{2\sqrt{60}}{n^3\pi^3}\left[1-(-1)^n\right].$$

Povšimněte si, že pro n sudé je $c_n = 0$. Pro sudá n jsou stacionární vlnové funkce liché vůči středu jámy, proto není překvapivé, že v rozvoji zadané funkce, která je sudá, tyto členy nejsou.

Rozklad vlnové funkce $\Psi(x)$ na součet vlastních vlnových funkcí má tedy tvar:

$$\Psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2\sqrt{60}}{n^3\pi^3}\left[1-(-1)^n\right]\psi_n(x).$$

c) Pravděpodobnost p_n naměření vlastního čísla E_n je:

$$p_n = |c_n|^2 = \frac{240}{n^6\pi^6}\left[1-(-1)^n\right]^2.$$

Povšimněte si, že pro sudá n jsou jak koeficienty c_n, tak pravděpodobnosti naměření E_n nulové.

d) Pro zapsání časového vývoje musíme využít rozklad Ψ do stacionárních vlnových funkcí ψ_n, tj.

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2\sqrt{60}}{n^3\pi^3}\left[1-(-1)^n\right]\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\hbar n^2 t}{2mL^2}}.$$

3.8 Lineární harmonický oscilátor (LHO)

Řešení tohoto problému je poměrně dlouhé, proto je rozděleno do oddělených a pojmenovaných částí.

1. Tvar potenciální energie.

Na následujících stránkách se budeme věnovat řešení stacionární Schrödingerovy rovnice pro obecnou jednorozměrnou potenciální energii $V = V(x)$ v okolí jejího lokálního minima; bod, ve kterém se minima nabývá, označíme a. Protože předpokládáme, že potenciální energie je funkcí spojitou a hladkou, lze ji v okolí bodu a rozvinout pomocí Taylorovy řady

$$V(x) = V(a) + \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}(a)(x-a) + \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2V}{\mathrm{d}x^2}(a)(x-a)^2 + \frac{1}{6}\frac{\mathrm{d}^3V}{\mathrm{d}x^3}(a)(x-a)^3 + ... \tag{3.17}$$

Nyní výraz 3.17 několika kroky zjednodušíme:
- Volnost volby nulové hladiny potenciální energie umožňuje položit $V(a) = 0$.
- Bez újmy na obecnosti uvažujme $a = 0$ (jedná se o jednoduché posunutí souřadnic).
- Protože určujeme hodnotu derivace $\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}$ v bodě, kde má potenciální energie lokální minimum, je tato derivace nulová.
- Nakonec se omezíme pouze na rozvoj do druhého řádu, tj. zanedbáme členy třetího

a vyššího řádu. Výraz 3.17 se těmito kroky redukuje na:

$$V(x) = \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2V}{\mathrm{d}x^2}(0)\,x^2.$$

Dostali jsme tedy model potenciální energie, která kvadraticky závisí na souřadnici. Díky své analogii s potenciální energií oscilátoru v klasické mechanice se tento model označuje jako **model lineárního harmonického oscilátoru** (někdy se také hovoří o parabolické potenciálové jámě).[13]

Vyčíslená druhá derivace v bodě $x = a = 0$ je konstantou, kterou označíme analogicky ke klasické mechanice $m\omega^2$, kde m je hmotnost částice a ω parametr určující tvar jámy. Výsledný tvar potenciální energie je tedy:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2.$$

2. Dosazení do Schrödingerovy rovnice.

Získaný tvar potenciální energie nyní dosadíme do stacionární Schrödingerovy rovnice a tu upravíme:

$$\begin{aligned}
\hat{H}\psi &= E\psi, \\
(\hat{T}+\hat{V})\psi &= E\psi, \\
\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi &= E\psi, \\
-\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\psi &= \frac{2mE}{\hbar^2}\psi. \qquad (3.18)
\end{aligned}$$

Získali jsme lineární diferenciální rovnici druhého řádu, která ale díky kvadratickému členu nemá konstantní koeficienty.

3. Přechod k bezrozměrné souřadnici.

Pro další řešení získané rovnice 3.18 přejdeme k bezrozměrné souřadnici, tzv. charakteristické délce ξ:

$$\xi = \frac{x}{x_0}, \qquad (3.19)$$

kde x_0 je vhodně zvolená konstanta. Abychom mohli v rovnici 3.18 tuto substituci provést, je třeba nejdříve najít vztah mezi derivací podle x a ξ:

$$\frac{\mathrm{d}\psi(\xi)}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}\psi(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\cdot\frac{\mathrm{d}\xi(x)}{\mathrm{d}x} = \frac{1}{x_0}\frac{\mathrm{d}\psi(\xi)}{\mathrm{d}\xi},$$

[13]Připomeňme ovšem, že obecně jde o rozvoj libovolné spojité a hladké potenciální energie kolem jejího lokálního minima.

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(\xi)}{\mathrm{d}x^2} = \frac{1}{x_0}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\mathrm{d}\psi(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right) = \frac{1}{x_0}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\frac{\mathrm{d}\psi(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right)\cdot\frac{\mathrm{d}\xi(x)}{\mathrm{d}x} = \frac{1}{x_0^2}\frac{\mathrm{d}^2\psi(\xi)}{\mathrm{d}\xi^2}.$$

V bezrozměrné souřadnici ξ tak dostává naše rovnice 3.18 podobu:

$$-\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2} + \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x_0^4\xi^2\psi = \frac{2mEx_0^2}{\hbar^2}\psi. \tag{3.20}$$

Pro zjednodušení rovnice 3.20 zvolíme hodnotu konstanty x_0:

$$x_0^2 = \frac{\hbar}{m\omega}. \tag{3.21}$$

Současně označíme jako ε:

$$\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}. \tag{3.22}$$

Po dosazení obou vztahů do 3.20 a drobné úpravě získáváme:

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2} - (\xi^2 - \varepsilon)\psi = 0. \tag{3.23}$$

4. Asymptotické řešení.

Rovnice 3.23 je stále rovnicí, která nemá snadno odhalitelné řešení, proto se teď zaměříme na hledání jejího asymptotického řešení, tj. řešení pro $\xi^2 \gg \varepsilon$, tedy pro velké hodnoty souřadnice $|x|$. Zanedbáním členu ε vůči ξ^2 dostáváme rovnici:

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2} - \xi^2\psi = 0. \tag{3.24}$$

Řešením této rovnice pro $x \to \pm\infty$ je vlnová funkce $\psi = A\mathrm{e}^{\frac{\xi^2}{2}} + B\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}}$. První člen ovšem pro $\xi \to \pm\infty$ diverguje a z požadavků na normovatelnost vlnové funkce je tedy nutné považovat jej za nefyzikální – asymptotickým řešením tak zůstává pouze vlnová funkce $\psi = B\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}}$.[14]

5. Přesné řešení.

Výše získané asymptotické řešení je vodítkem k tomu, v jaké podobě hledat přesné řešení rovnice 3.23 – budeme jej uvažovat ve tvaru:

$$\psi(\xi) = u(\xi)\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}}, \tag{3.25}$$

[14] Pozor, pokud bychom vlnovou funkci $\psi = B\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}}$ dosadili do rovnice 3.24, nedostaneme rovnost $0 = 0$ tak, jak jsme při dosazování řešení zvyklí, ale rovnici $-Be^{-\frac{\xi^2}{2}} = 0$. Pohybujeme se ovšem v asymptotickém případě $\xi \to \pm\infty$, kde skutečně $\lim_{\xi\to\pm\infty} -B\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}} = 0$.

kde $u = u(\xi)$ je zatím blíže neurčená funkce modifikující klesající exponenciálu zejména pro malé hodnoty ξ. Tento tvar řešení dosadíme do rovnice 3.23 a upravíme. Pro zpřehlednění zápisu nebudeme u veličin uvádět proměnné a derivaci podle ξ budeme teď značit čárkou:

$$\psi'' - (\xi^2 - \varepsilon)\psi = 0,$$

$$(u\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}})'' - (\xi^2 - \varepsilon)u\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}} = 0,$$

$$(u'\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}} - u\xi\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}})' - (\xi^2 - \varepsilon)u\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}} = 0,$$

$$u''\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}} - u'\xi\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}} - u'\xi\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}} - u\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}} + u\xi^2\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}} - (\xi^2 - \varepsilon)u\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}} = 0.$$

Pokud vydělíme celou rovnici exponenciálou a provedeme další jednoduché úpravy zbylých členů, dostaneme:

$$u'' - 2u'\xi + (\varepsilon - 1)u = 0. \tag{3.26}$$

Tím jsme dostali rovnici pro neznámou funkci $u(\xi)$, tuto funkci budeme hledat pomocí jejího rozvoje do Taylorovy řady:

$$u = \sum_{l=0}^{\infty} a_l \xi^l. \tag{3.27}$$

Pro potřeby dalších výpočtů si spočítáme první a druhou derivaci funkce u podle ξ.

$$u' = \left(\sum_{l=0}^{\infty} a_l \xi^l\right)' = \sum_{l=1}^{\infty} a_l l \xi^{l-1} = \sum_{l=0}^{\infty} a_{l+1}(l+1)\xi^l,$$

$$u'' = \left(\sum_{l=0}^{\infty} a_{l+1}(l+1)\xi^l\right)' = \sum_{l=1}^{\infty} a_{l+1}(l+1)l\xi^{l-1} = \sum_{l=0}^{\infty} a_{l+2}(l+2)(l+1)\xi^l.$$

Oba vzniklé výrazy dosadíme do rovnice 3.26:

$$\sum_{l=0}^{\infty} \left(a_{l+2}(l+2)(l+1)\xi^l - 2a_{l+1}(l+1)\xi^{l+1} + (\varepsilon - 1)a_l\xi^l\right) = 0. \tag{3.28}$$

Abychom dostali ve všech členech výrazu 3.28 stejnou mocninu u ξ, posuneme v prostředním členu sčítací index: $(l+1) \to l$. Člen se tím nijak nezmění, neboť v něm takto přibude jen nulový sčítanec $2a_0 \cdot 0 \cdot \xi^0$. Sumu 3.28 pak lze zjednodušit:

$$\sum_{l=0}^{\infty} \left[a_{l+2}(l+2)(l+1) - 2a_l l + (\varepsilon - 1)a_l\right] \xi^l = 0.$$

Aby byla tato podmínka splněna pro všechna ξ, musí být výraz v hranaté závorce nulový ve všech členech (tj. pro všechny l), což vede na rekurentní vztah mezi koeficienty a_l:

$$a_{l+2} = a_l \frac{2l - \varepsilon + 1}{(l+2)(l+1)}. \tag{3.29}$$

6. Diskuze rekurentního vztahu pro koeficienty Taylorovy řady funkce $u(\xi)$.

Je zřejmé, že pro úplné zadání funkce $u(\xi)$ je třeba zadat hodnoty koeficientů a_0 a a_1, což odpovídá dvěma integračním konstantám, které by obecné řešení lineární diferenciální rovnice druhého řádu mělo mít. Ukazuje se ale, že volba a_0 a a_1 zcela neomezená není – projdeme nyní čtyři možné případy:

- Volba $a_0 = 0 \wedge a_1 = 0$ není možná, neboť všechny koeficienty v řadě 3.27 by byly nulové a získali bychom tak konstantně nulovou vlnovou funkci, což odporuje požadavku její normovatelnosti.

- Volbou $a_0 = 1, a_1 = 0$ dostáváme vlnovou funkci $\psi = \psi(\xi)$, která řeší Schrödingerovu rovnici 3.23. Tato vlnová funkce je sudá, neboť v řadě 3.27 zůstanou nenulové pouze členy se sudými exponenty ξ.

- Podobně obrácenou volbou $a_0 = 0, a_1 = 1$ dostáváme jako řešení lichou vlnovou funkci $\psi = \psi(\xi)$, protože v řadě 3.27 zůstanou nenulové koeficienty pouze u členů s lichými exponenty ξ.

- Volba $a_0 \neq 0 \wedge a_1 \neq 0$ by vedla na obecnou funkci (ani lichou, ani sudou), ale v dalším odstavci se ukáže, že také není možná.

7. Požadavek konečnosti Taylorovy řady.

Problém řady 3.27 s koeficienty danými vztahem 3.29 je v tom, že pokud je tato řada nekonečná, chová se pro $l \to \infty$ jako funkce e^{ξ^2}. Tím je podle vztahu 3.25: $\psi(\xi) = e^{\xi^2} e^{-\frac{\xi^2}{2}} = e^{\frac{\xi^2}{2}}$, což je funkce, která není normovatelná, a tudíž nemůže být vlnovou funkcí. Nezbývá tedy, než zajistit, aby řada 3.27 měla nenulový pouze konečný počet členů, což je splněno, pokud pro určité $l = n$ bude platit:

$$a_{n+2} = 0 \;\Rightarrow\; \varepsilon = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, ... \tag{3.30}$$

Vzhledem k tvaru rekurentního vztahu 3.29 lze volbou energie E (respektive její bezrozměrné varianty ε) ukončit rozvoj buď pouze sudých, nebo pouze lichých členů řady 3.27. Z toho plyne, že pokud volbou energie „zastavíme rekurzi“ sudých členů, je třeba položit všechny liché koeficienty nule volbou $a_1 = 0$, a naopak. To je také důvod, proč není možné současně volit koeficienty $a_0 \neq 0 \wedge a_1 \neq 0$, jak již bylo uvedené výše.

Poznámka – důkaz divergence nekonečné řady
Výše je bez důkazu tvrzeno, že v případě, kdy je funkce $u(\xi)$ vyjádřena jako nekonečná řada, chová se asymptoticky stejně jako funkce e^{ξ^2}. Pojďme si to dokázat.

Nejprve nalezněme rozvoj této funkce do řady. Vyjdeme ze známého rozvoje exponenciály

$$\mathrm{e}^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} x^k,$$

kam dosadíme $x = \xi^2$ a dostaneme

$$\mathrm{e}^{\xi^2} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \xi^{2k} = \sum_{k=0}^{\infty} b_{2k} \xi^{2k}.$$

Pro posouzení asymptotického chování spočtěme podíl dvou sousedních nenulových koeficientů rozvoje

$$\frac{b_{2k+2}}{b_{2k}} = \frac{\frac{1}{(k+1)!}}{\frac{1}{k!}} = \frac{1}{k+1} \to \frac{1}{k}.$$

Ještě uvážíme, že index k jsme použili pro sčítání jen přes sudé členy rozvoje a v posledním vztahu dosadíme $l = 2k$

$$\frac{b_{l+2}}{b_l} \to \frac{2}{l}.$$

Stejný podíl spočítáme i pro funkci $u(\xi)$

$$\frac{a_{l+2}}{a_l} = \frac{2l + 1 - \epsilon}{(l+1)(l+2)} \to \frac{2}{l}.$$

Vidíme, že koeficienty rozvoje „s velkými indexy“ se chovají u obou funkcí totožně, funkce tedy mají stejné chování pro velké hodnoty ξ.

8. Kvantovací podmínka.

Zásadním výsledkem předcházejících výpočtů je podmínka konečnosti Taylorovy řady funkce $u(\xi)$, která je dána vztahem 3.30. Za ε nyní dosadíme ze substituce 3.22 a dostáváme:

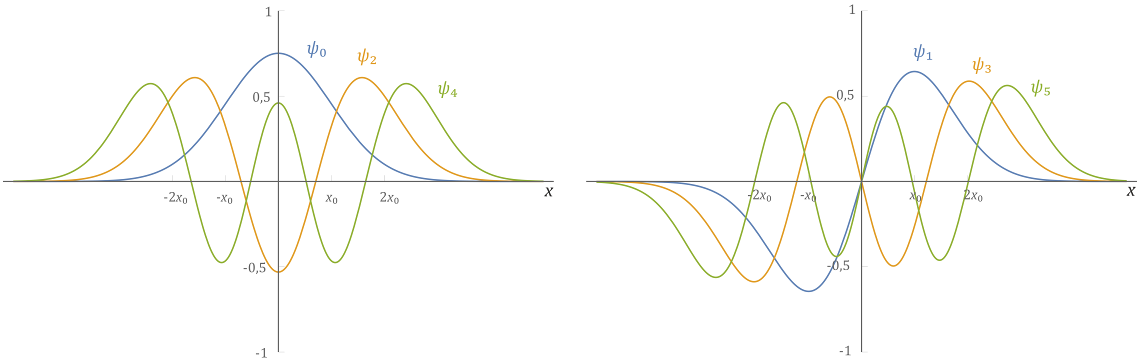
$$\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega} = 2n + 1.$$

Energie E zjevně závisí pouze na volbě čísla n, což zdůrazníme přeznačením $E \to E_n$, a zapíšeme finální vztah pro nalezená vlastní čísla energie:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \qquad n = 0, 1, 2, ... \tag{3.31}$$

Stojí za povšimnutí, že energetické spektrum dané vztahem 3.31 je **ekvidistantní**

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega.$$



Obrázek 3.23: Stacionární vlnové funkce harmonického oscilátoru pro šest nejnižších povolených energií. Sudá řešení jsou vlevo, lichá vpravo.

Energie základního stavu[15] ($n = 0$) bývá někdy označována jako **energie nulových kmitů** a je nenulová: $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$. Uvědomte si, že při nulové energii bychom znali přesně hybnost částice (musela by být nulová) a také bychom znali její polohu s konečnou neurčitostí, čímž by byl součin neurčitostí polohy a hybnosti nulový a porušili bychom Heisenbergovu relaci neurčitosti. Název nulové kmity odkazuje na využití modelu LHO k modelování kmitů částic v krystalické mřížce, protože do základního stavu se dostanou všechny částice při teplotě $T = 0\,\mathrm{K}$, tj. jedná se o „kmity“, které probíhají i při nulové teplotě.

9. Stacionární vlnové funkce.

Vlastním číslům energie E_n daným podmínkou 3.31 přísluší podle vztahu 3.25 vlastní (stacionární) vlnové funkce:

$$\psi_n = u_n(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \tag{3.32}$$

Polynomy $u_n(\xi)$ vzniklé pro dané n omezením řady 3.27 se nazývají **Hermitovy polynomy** stupně n, označují se $H_n(\xi)$ a platí pro ně například vztah:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n}\left(e^{-\xi^2}\right). \tag{3.33}$$

Stacionární vlnová funkce ψ_n má potom tvar

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{3.34}$$

kde normovací konstantu můžeme označit jako A_n a její hodnotu jsme zde uvedli bez výpočtu:

$$A_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}}. \tag{3.35}$$

[15]Základní stav je stav s nejmenší možnou energií.

Pokud přejdeme zpět k proměnné x (pomocí substituce 3.19), získáme **finální tvar stacionárních vlnových funkcí pro lineární harmonický oscilátor**:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \frac{1}{\sqrt{x_0}} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}, \quad n = 0, 1, 2, ... \tag{3.36}$$

Povšimněme si, že použitím substituce se změnila normovací konstanta o člen obsahující x_0 (viz vztah 3.21).

Tvary vlnových funkcí pro nejnižší energie zachycuje obrázek 3.23. Povšimněte si, že se opět střídají sudá a lichá řešení a že počet lokálních extrémů vlnové funkce opět odpovídá pořadí vlnové funkce (díky tomu, že jsme se rozhodli vlnové funkce číslovat od nuly, je tentokrát počet lokálních extrémů vlnové funkce roven $n + 1$).

Úkol 3.12 Dosazením do vztahu 3.33 dokažte, že pro $n = 0, 1, 2, 3, 4$ mají Hermitovy polynomy následující tvary:

a) $H_0(\xi) = 1$, b) $H_1(\xi) = 2\xi$,
c) $H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$, d) $H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$,
e) $H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12$.

Zkontrolujte, že pro sudá n dostáváte sudé funkce, pro lichá n funkce liché.

Úkol 3.13

A. Napište vlnovou funkci odpovídající částici v základním stavu lineárního harmonického oscilátoru. Vyjděte ze vztahu 3.36.

B. Napište časový vývoj vlnové funkce pro částici v základním stavu ψ_0.

C. Napište časový vývoj vlnové funkce pro částici ve stavu ψ_n.

D. Zapište obecné řešení nestacionární (časové) Schrödingerovy rovnice pro lineární harmonický oscilátor.

Řešení:
A. Vlnová funkce popisující základní stav (v čase $t = 0$):

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}.$$

B. Vlnová funkce popisující základní stav v obecném čase t:

$$\psi_0(x,t) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}e^{-\frac{1}{2}\mathrm{i}\omega t}.$$

C. Vlnová funkce popisující n-tý stav v obecném čase t:

$$\psi_n(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}\frac{1}{\sqrt{x_0}}H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}\mathrm{e}^{\frac{E_n t}{\mathrm{i}\hbar}} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}\; x_0}}H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t(n+\frac{1}{2})}.$$

D. Obecné řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty}c_n\psi_n(x,t) = \frac{1}{\sqrt{x_0}}\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}\sum_{n=0}^{\infty}c_n\frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t(n+\frac{1}{2})},\ c_n \in \mathbb{C}.$$

Úkol 3.14 Ukažte kolmost vlastních funkcí ψ_0 a ψ_1.

Výpočtová úloha 3.7
Pro základní stav částice v LHO ověřte relaci neurčitosti.

Řešení:
Potřebné střední hodnoty jsou:

$$\langle\hat{x}\rangle_{\psi_0} = \langle\hat{p}\rangle_{\psi_0} = 0$$

$$\langle\hat{x^2}\rangle_{\psi_0} = \frac{x_0^2}{2} = \frac{\hbar}{2m\omega},\quad \langle\hat{p^2}\rangle_{\psi_0} = \frac{\hbar^2}{2x_0^2} = \frac{1}{2}m\hbar\omega.$$

Dosazením do relací neurčitosti dostaneme

$$\delta x\delta p = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sqrt{\frac{1}{2}m\hbar\omega} = \frac{\hbar}{2} \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Vidíme, že základní stav LHO splňuje relace neurčitosti s rovností, tj. „využije beze zbytku limit v přesnosti toho, jak můžeme znát polohu a hybnost“.

3.9 Volná částice, řešení ve tvaru vlnového klubka

Bude doplněno

3.10 Separace proměnných – převod vícerozměrných úloh na jednorozměrné

Uvažujme teď případ, kdy se částice pohybuje ve dvoudimenzionálním prostoru a její časově nezávislý hamiltonián má speciální tvar, a to takový, že se dá napsat jako součet dvou částí, z nichž každá závisí jen na jedné souřadnici

$$\hat{H}(x,y) = \hat{H}_x(x) + \hat{H}_y(y).$$

To znamená, že souřadnice se dají v hamiltoniánu oddělit = separovat, a proto se tento tvar nazývá separovaný.

Úkol 3.15 Ukažte, že hamiltonián volné částice, která se pohybuje ve dvoudimenzionálním prostoru, je separovatelný.

Diskutujte, zda lze za separovatelný problém považovat i částici ve dvoudimonezionální potenciálové jámě tvaru obdélníku nebo kruhu. Můžete rozlišit konečně hlubokou a nekonečně hlubokou jámu.

Nebudeme teď hledat zcela obecné řešení, ale pouze řešení v takovém tvaru, které je součinem funkce závislé jen na jedné souřadnici a funkce závislé na druhé souřadnici, tj.

$$\psi(x,y) = X(x)Y(y).$$

Dosaďme tuto vlnovou funkci do stacionární Schrödingerovy rovnice 2.71

$$\hat{H}\psi = E\psi \qquad \Rightarrow \qquad (\hat{H}_x + \hat{H}_y)XY = EXY,$$

kde jsme pro přehlednost vynechali proměnné. Levou stranu roznásobíme a funkce, na kterou příslušná část hamiltoniánu nepůsobí, tj. jsou vůči němu jako konstanta, vytkneme před operátor.

$$Y\hat{H}_x X + X\hat{H}_y Y = EXY.$$

Celou rovnici vydělíme vlnovou funkcí XY

$$\frac{\hat{H}_x X}{X} + \frac{\hat{H}_y Y}{Y} = E$$

a druhý člen na levou převedeme na pravou stranu

$$\frac{\hat{H}_x X}{X} = E - \frac{\hat{H}_y Y}{Y}.$$

Vidíme, že levá strana rovnice závisí pouze na souřadnici x a pravá strana rovnice závisí jen na souřadnici y. S tím jsme se již v potkali v kapitole 2.4.2 a víme, že v takovém případě se obě strany rovnice rovnají konstantě. Tuto konstantu zde označíme E_x. Dostáváme tedy

$$\frac{\hat{H}_x X}{X} = E_x \qquad \Rightarrow \qquad \hat{H}_x X = E_x X,$$

což je vlastně stacionární Schrödingerova rovnice pro jednodimenzionální funkci X s příslušnou částí hamiltoninu. Úplně stejnou úvahu můžeme udělat i s členem závislým na y a dostali bychom

$$\hat{H}_y Y = E_y Y,$$

kde mezi konstantami platí

$$E = E_x + E_y.$$

Vidíme, že pokud je hamiltonián dvoudimenzionálního problému separovatelný, potom lze vyřešit jednodimezionální stacionární Schrödingerovu rovnici pro každou ze souřadnic zvlášť. Celková energie je potom součtem energií jednodimenzionálních problémů a vlnová funkce součinem řešení obou dílčích rovnic.

Úkol 3.16 Zobecněte předchozí případ pro pohyb částice ve třech dimenzích.

V úkolu 15 jsme zjistili, že volná částice je separovatelná. Pojďme se teď podívat na jiný případ, a to vícedimenzionální harmonický oscilátor. Nejprve ho uvažujme klasicky. Pro oscilátor platí, že potenciální energie je úměrná druhé mocnině vzdálenosti od rovnovážné polohy, tj.

$$V(x,y) = \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2), \text{ resp.} V(x,y,z) = \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2).$$

Jak si takový systém představit? Dvourozměrný pohyb lze jako model vzít kuličku, která se kutálí v misce parabolického tvaru. Druhá možnost je docílit takového pohybu pomocí dvou nebo tří dvojic navzájem kolmých pružin (viz obrázek), kde při malých výchylkách také můžeme uvažovat, že jsou pružiny na sobě nezávislé a jejich energie pružnosti stačí sečíst. Tento model je velmi důležitý, protože pomocí harmonického kmitání v okolí rovnovážných poloh se modeluje i pohyb atomů v krystalu.

Sestavme pro dvoudimenzionální pohyb Hamiltonův operátor

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(\hat{x}^2 + \hat{y}^2),$$

dosaďme za souřadnice a složky hybnosti jejich operátory

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2),$$

přeuspořádáme členy

$$H = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2\right).$$

Vidíme, že se hamiltonián dá napsat jako součet části, která závisí jen na souřadnici x, a část, která závisí jen souřadnici y, je tedy separovatelný. V případě třídimenzionálního oscilátoru je výpočet zcela obdobný.

Řešení úkolů z kapitoly 3

Řešení 3.6 *Výsledek*: Přesně $\frac{1}{9}$, tj. cca 11,1 %.

Řešení 3.7 *Výsledek*: Pro hmotnost α částice $m = 6{,}64{\cdot}10^{-27}\ \mathrm{kg} \doteq 3{,}73\,\mathrm{GeV}/c^2$ dostáváme dosazením do vztahu 3.9 pravděpodobnost opuštění jádra (resp. koeficient průchodu T) přibližně 61,5 %.

Řešení 3.8 *Výsledek*: Pokud budeme pro velké x uvažovat $\sinh x \approx e^x/2$, dostaneme pravděpodobnost:

$$p \approx 4e^{-\frac{0{,}02}{\hbar}} = 4{\cdot}10^{-\frac{0{,}02}{\hbar}\cdot\log_{10} e} \approx 4{\cdot}10^{-8{,}24\cdot 10^{31}}$$

Tato pravděpodobnost je nepředstavitelně malá – v případě makroskopických objektů se kvantově-mechanické jevy neprojevují.

Řešení 3.9 Řešením je jakkákoliv funkce tvaru:

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\left(c_1 \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) + c_2 \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) + c_3 \sin\left(\frac{3\pi x}{L}\right)\right),$$

kde $c_1, c_2, c_3 \in \mathbb{C}$ jsou takové konstanty, že $|c_1|^2 = 0{,}5 \wedge |c_2|^2 = 0{,}2 \wedge |c_3|^2 = 0{,}3$.

Řešení 3.10 Časový vývoj stacionární vlnové funkce je

$$\psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) e^{\frac{E_n t}{i\hbar}} = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) e^{i\hbar\frac{n^2\pi^2}{2mL^2}t}.$$

Obecné řešení pro nestacionární Schrödingerovu rovnici má tvar

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) e^{i\hbar\frac{n^2\pi^2}{2mL^2}t},\ c_n \in \mathbb{C}.$$

Řešení 3.11

Řešení 3.14

Ověření kolmosti obou funkcí je ekvivalentní ověření rovnosti $\langle\psi_0 \mid \psi_1\rangle = 0$. Tento skalární součin bude mít tvar:

$$\langle\psi_0 \mid \psi_1\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \psi_1 \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} \frac{1}{\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}} \frac{2x}{x_0} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$$

Po vytknutí konstant dostaneme:

$$\langle\psi_0 \mid \psi_1\rangle = \frac{\sqrt{2}}{x_0^2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} = 0$$

Nulovost integrálu snadno odhalíme bez počítání – integrujeme lichou funkci přes symetrický interval, integrací tedy vznikne funkce sudá a hodnoty získané z ní dosazením integračních mezí se odečtou. Funkce ψ_0 a ψ_1 jsou na sebe tedy kolmé.