

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 nezávislý 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 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. $V(x) = V = konst.$

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi &= E\psi, \\ (\hat{T} + \hat{V})\psi &= E\psi, \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V\right)\psi &= E\psi,\end{aligned}$$

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

Rovnice 3.1 je homogenní diferenciální rovnicí druhého řádu s konstantními koeficienty.¹ Její řešení má tvar $\psi = e^{\alpha x}$, dosazením do rovnice 3.1 a zkrácením $e^{\alpha x}$ tak dostáváme:

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

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 je 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

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

Rovnice 3.1 má tedy dvě nezávislá řešení, která můžeme zkombinovat

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (3.3)$$

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 44). První člen tedy odpovídá situaci, kdy taková částice „letí vlevo“ a druhý člen odpovídá „pohybu vpravo“.
- Protože platí $e^{ikx} = \cos(kx) + i \sin(kx)$, 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.

¹Tento typ rovnice známe již z mechaniky, kde jsme se z ní potkali při řešení harmonického oscilátoru.

Řešení pro $E < V$

Opět nejprve klasicky: Je-li celková energie E částice menší než je potenciální energie V , je kinetická energie $T = E - V$ je 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 ukvapením, vyřešíme rovnici 3.1 i pro tento případ a uvidíme, zda získaná řešení povedou k fyzikálně smysluplným řešením. 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:

$$\psi = Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x}, \quad (3.4)$$

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

Komentáře:

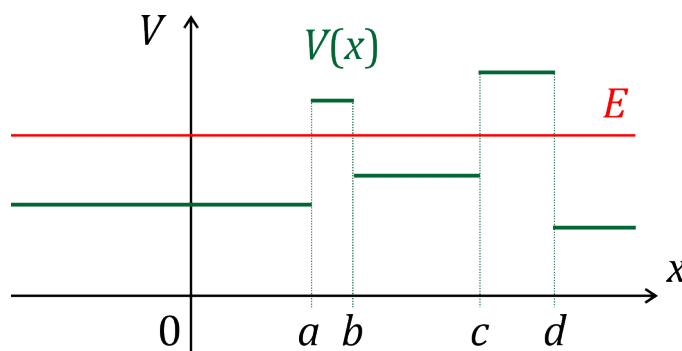
- Nalezené řešení je součtem dvou reálných exponenciál. Z toho je patrné, že na neomezeném intervalu, tj. v limitách pro $x \rightarrow \pm\infty$ zjevně diverguje. Nelze ho tedy na takovém intervalu normovat. Neexistuje tedy vlnová funkce, pro kterou by platilo $E < V$ na celém prostoru.
- Na jednostranně 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, tak 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 budeme 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 3.1 Použijte animaci/aplet dostupný na adrese <http://fyzweb.cz/materialy/qm-potencialy/> a modelujte, jak vypadá řešení pro různé hodnoty V a E . Jak se řešení proměňuje, pokud se mění hodnota E ?

3.2 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. 3.1. Problém budeme řešit opět pro jednu částici s celkovou energií E , jejíž hodnota je v obrázku znázorněna červeně.



Obrázek 3.1: 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. 3.1 tak můžeme – na základě předcházející podkapitol (konkrétně vztahů 3.3 a 3.4) zapsat obratem řešení v jednotlivých intervalech:

- v intervalu $(-\infty, a)$: $\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, $k = \sqrt{\frac{2m(E-V_1)}{\hbar^2}}$
- v intervalu (a, b) : $\psi = Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x}$, $\alpha = \sqrt{\frac{2m|E-V_2|}{\hbar^2}}$
- v intervalu (b, c) : $\psi = Fe^{ilx} + Ge^{-ilx}$, $l = \sqrt{\frac{2m(E-V_3)}{\hbar^2}}$
- v intervalu (c, d) : $\psi = He^{\beta x} + Je^{-\beta x}$, $\beta = \sqrt{\frac{2m|E-V_4|}{\hbar^2}}$... atd.

Získali jsme tedy řešení Schrödingerovy stacionární 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“).

Například v bodě a tyto požadavky vypadají následovně:

- Požadavek spojitosti v $x = a$:

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

- Požadavek spojitě 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 podobně 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 A a B v prvním intervalu jsou díky požadavkům na spojitost a hladkost určeny i všechny ostatní integrační konstanty a tedy podoba celé vlnové funkce.

Úkol 3.2 Vyzkoušet si sešívání na apletu.

3.3 Potenciálový schod (stupeň)

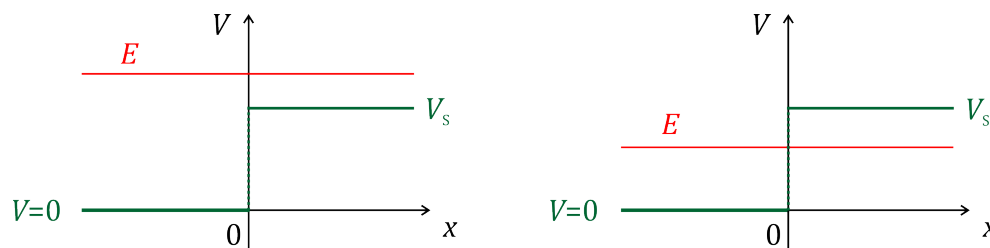
Poznatky z předcházející kapitoly nyní budeme aplikovat na tzv. potenciálový stupeň výšky V_S , kde bod nespojitosti potenciální energie umístíme do bodu $x = 0$.² Řešení rozdělíme na dvě části podle celkové energie E částice.

Úkol 3.3 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. Tvar vlnové funkce pro různé hodnoty energie E popište, popište i změny průběhu ψ při změnách E .

Řešení pro $E > V_S$

Situace je zachycena na obr. 3.2 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:

²Grafy potenciální energie, ale i názvosloví převzaté s tíhového pole někdy svádí k tomu, si představovat, že částice (elektron) opravdu musí překonat nějaký schod, překážku ve smyslu vyvýšeniny v prostoru. Ve skutečnosti jde ale o stupeň v potenciální energii, což se v případě nabitého elektronu bude mnohem jednodušeji realizovat pomocí elektrostatického pole, tj. např. elektron se pohybuje ve dvou trubkách, které jsou udržovány na odlišných potenciálech. „Schod“ je právě při přechodu z jedno trubky do druhé.

Obrázek 3.2: Vlevo situace pro $E > V_S$, vpravo pro $0 < E < V_S$

- Pro $x < 0$: $\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, kde $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$
- Pro $x > 0$: $\psi = Ce^{ilx} + De^{-ilx}$, kde $l = \sqrt{\frac{2m(E-V_S)}{\hbar^2}}$

Ted' 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 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.³

Jednotlivým částem řešení výše tak můžeme připsat následující význam:

- Člen Ae^{ikx} je vlastní funkcí operátoru hybnosti (viz 2.30) s vlastní hodnotou hybnosti rovnou $p = \sqrt{2mE}$; klasicky by tedy šlo o částici, která by se pohybovala směrem doprava, tj. ve směru kladné osy x , šlo by tedy o částici, které na schod „nalétává“.⁴
- Člen Be^{-ikx} je také vlastní funkcí operátoru \hat{p} a přísluší vlastnímu číslu s opačným znaménkem než předchozí člen, klasicky by tedy šlo o volnou částici pohybující se v opačném směru, tj. takovou, která se od schodu „odrazila“.
- Člen Ce^{ilx} 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 De^{-ilx} 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 $D = 0$.

³Tato 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.

⁴Pro někoho může mít obtížné si představit, že vlnová funkce ve tvaru rovinné vlny odpovídá nalétávající částici. V takovém případě může pomoci si představit, že se jedná o souvislý proud částic. Pravděpodobnost odrazu, resp. průchodu by potom odpovídala tomu, jaká část částic se odrazí, resp. projde.

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

- požadavek spojitosti v $x = 0$: $A + B = C$
- požadavek hladkosti v $x = 0$: $Aik - Bik = Cil$.

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

$$B = \frac{k-l}{k+l}A, \quad C = \frac{2k}{k+l}A. \quad (3.5)$$

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 hustota toku pravděpodobnosti (viz 2.69), která má v jednorozměrném případě tvar:

$$j = \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right)$$

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} :

$$j_I = \frac{\hbar}{2im} \left(A^* e^{-ikx} \frac{dAe^{ikx}}{dx} - Ae^{ikx} \frac{dA^* e^{-ikx}}{dx} \right) = \frac{\hbar k}{m} |A|^2$$

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

$$j_R = \frac{\hbar}{2im} \left(B^* e^{ikx} \frac{dB e^{-ikx}}{dx} - B e^{-ikx} \frac{dB^* e^{ikx}}{dx} \right) = -\frac{\hbar k}{m} |B|^2 = -\frac{\hbar k}{m} \left(\frac{k-l}{k+l} \right)^2 |A|^2,$$

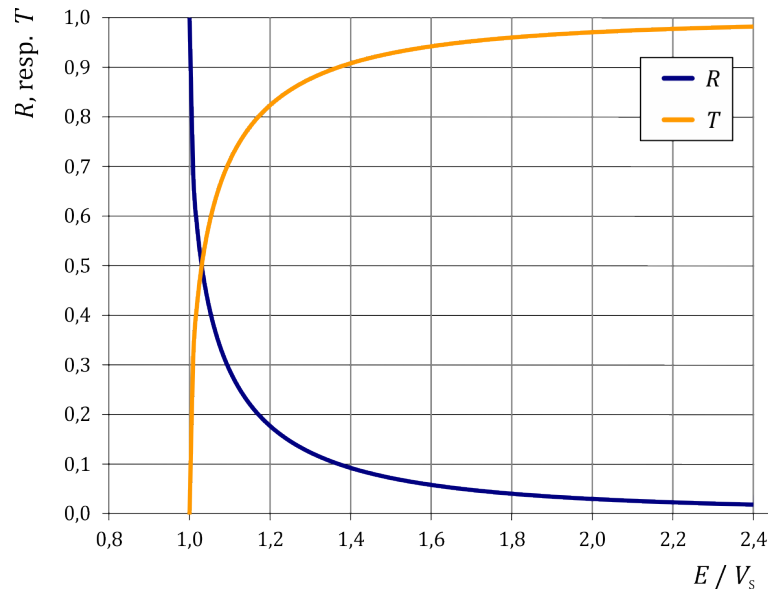
můžeme si všimnout, že tok vyšel záporný, což odpovídá naší klasické analogii částice pohybující se vlevo.

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

$$j_T = \frac{\hbar}{2im} \left(C^* e^{-ilx} \frac{dCe^{ilx}}{dx} - Ce^{ilx} \frac{dC^* e^{-ilx}}{dx} \right) = \frac{\hbar l}{m} |C|^2 = \frac{\hbar l}{m} \left(\frac{2k}{k+l} \right)^2 |A|^2.$$

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 3.3: Závislost koeficientů R a T na poměru $\frac{E}{V}$ pro potenciálový schod.

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

Snadno lze ověřit, že platí $R + T = 1$, což znamená, že částice se nutně buď odrazí, nebo projde, není jiná možnost. Dále 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. 3.3.

Z právě provedeného výpočtu nám nevyplývaly 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 3.4 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. 3.3.

Výpočtová úloha 3.1

Svazek elektronů s kinetickou energií 80 eV vletí prolétává z uzemněné kovové trubice do trubice s elektrickým potenciálem 50 V. Tuto situaci budeme kvantově 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. 3.2 vpravo. V klasickém případě by částice přilétávající zleva k potenciálovému chodu 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 $x < 0$: $\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, kde $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$
- pro $x > 0$: $\psi = Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x}$, kde $\alpha = \sqrt{\frac{2m|E-V_S|}{\hbar^2}}$

Protože člen $Ce^{\alpha x}$ diverguje pro $x \rightarrow +\infty$, což neumožňuje tuto vlnovou funkci v oblasti $x > 0$ normovat, je nutné⁵ položit $C = 0$.

Sešívací podmínky kladené na získané vlnové funkce pak nabývají podobu:

- Požadavek spojitosti v $x = 0$: $A + B = D$,
- Požadavek hladkosti v $x = 0$: $ikA - ikB = -\alpha D$.

Tuto soustavu dvou rovnic o třech neznámých vyřešíme podobně jako v předchozí části

⁵Uvědomte si, že důvod, proč klademe jednu z integračních konstant rovnu nule, je teď zcela odlišný v porovnání s důvodem použitým v předchozí části.

tak, že koeficienty B a D vyjádříme pomocí koeficientu A :

$$B = \frac{ik + \alpha}{ik - \alpha} A, \quad D = \frac{2ik}{ik - \alpha} A \quad (3.6)$$

Než se pustíme do výpočtu koeficientu R a T , tak si opět spočteme příslušné hustoty toku pravděpodobnosti. Řešení v levé části je stejné, proto i hustoty toků pravděpodobnosti pro oba členy budou stejné. V pravé části, tj. v oblasti $x > 0$ (odpovídá „částicím, které prošly“), máme reálnou vlnovou funkci, takže víme, že z ní spočítaná hustota toku bude nulovou, přesto to můžeme explicitně spočítat

$$j_T = \frac{\hbar}{2im} \left(D^* e^{-\alpha x} \frac{dD e^{-\alpha x}}{dx} - D e^{-\alpha x} \frac{dD^* e^{-\alpha x}}{dx} \right) = 0.$$

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

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

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

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 i „klasicky nedosažitelné“ oblasti, ve které její celková energie E je 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 menší než potenciální. Řešení se opět rozpadá na dva intervaly

- pro $x < 0$: $\psi = Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x}$, kde $\alpha = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$,
- pro $x > 0$: $\psi = Ce^{\beta x} + De^{-\beta x}$, 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 spojitě a hladké.

Výpočtová úloha 3.2

Pokud si chcete napojování vlnových funkcí více vyzkoušet, spočtěte, jak bude vypadat řešení pro opačně orientovaný potenciálový schod, tj. takový, kde je $V(x) > 0$ pro $x < 0$ a $V(x) = V_0 = 0$ pro $x > 0$; opět řešte pro případy $E \geq V$ a $E < V$. Dále určete koeficienty odrazu a průchodu (R a T) pro oba případy. Zjistíte, že i na tomto schodu se mohou částice nalétávající zleva s jistou pravděpodobností odrážet, přestože jejich energie je vyšší než výška schodu – tento efekt v klasické mechanice nenalezneme.

3.4 Potenciálová bariéra a tunelový jev

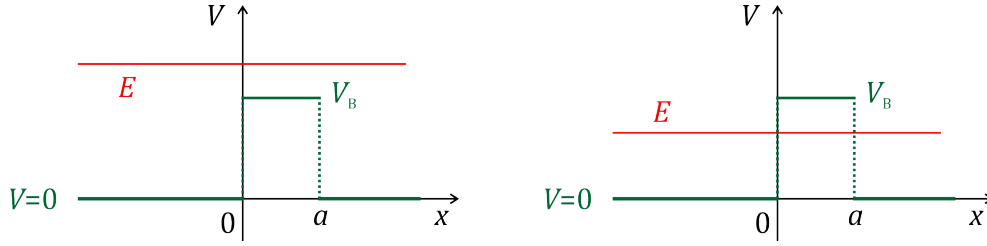
Velmi podobným postupem, jaký jsme použili v předcházející kapitole, nyní vyšetříme potenciálovou bariéru o výšce V_B a šířce a . Body nespojitosti potenciální energie budeme uvažovat v bodech $x = 0$ a $x = a$. Řešení opět rozdělíme na dva případy⁶ podle toho, zda celková energie E částice je větší než výška bariéry V_B , nebo naopak nižší než výška bariéry V_B .

Řešení pro $E > V_B$

Situace je zachycena na obr. 3.4 vlevo. Řešení stacionární Schrödingerovy rovnice budeme hledat na třech intervalech, a získáme ho v tomto tvaru:

- Pro $x < 0$: $\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, kde $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$
- Pro $0 < x < a$: $\psi = Ce^{ilx} + De^{-ilx}$, kde $l = \sqrt{\frac{2m(E-V_B)}{\hbar^2}}$

⁶Případ, kdy je energie $E < 0$ již znovu vyšetřovat nebudeme, opět bychom zjistili, že nedává žádné řešení.

Obrázek 3.4: Vlevo situace pro $E > V_B$, vpravo pro $0 < E < V_B$

- Pro $x > a$: $\psi = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}$, kde $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

Protože budeme řešit stejnou situaci jako v případě potenciálového schodu, tak člen Ge^{-ikx} 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 $x = 0$:

$$A + B = C + D$$

$$ikA - ikB = ilC - ilD$$

Pro $x = a$:

$$Ce^{ila} + De^{-ila} = Fe^{ika}$$

$$ilCe^{ila} - ilDe^{-ila} = ikFe^{ika}$$

Dostali sem soustavu čtyř rovnic o pěti neznámých,⁷ která nám umožňuje například vyjádřit konstanty A až D pomocí konstanty F . Výpočet není náročný, jen je trochu zdlouhavý

$$A = \frac{(k+l)^2 e^{-ila} - (k-l)^2 e^{ila}}{4lk} e^{ika} F$$

$$B = \frac{2i \sin(al)(l^2 - k^2)}{4lk} e^{ika} F$$

$$C = \frac{l+k}{2l} e^{i(k-l)a} F$$

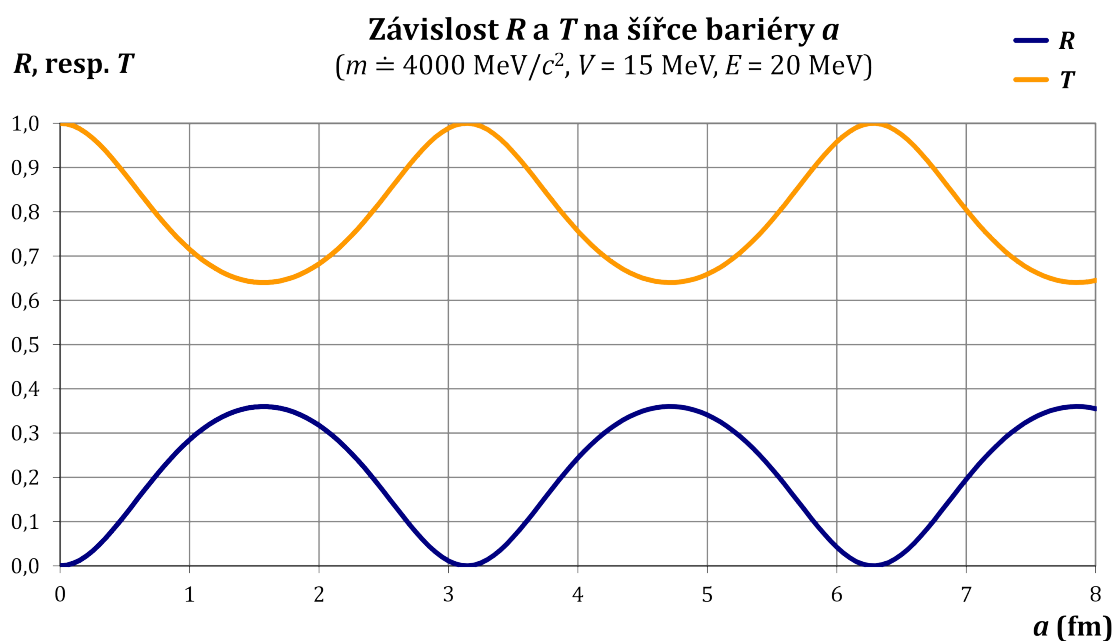
$$D = \frac{l-k}{2l} e^{i(k+l)a} F$$

Vlnová funkce tak obsahuje pouze integrační konstantu F , jehož hodnotu můžeme určit pomocí normovací podmínky. Obvyklým způsobem určíme koeficient odrazu R :

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

Koeficient průchodu T je roven pravděpodobnosti, že částici nalezneme v oblasti $x > a$ – hustota toku pravděpodobnosti j_T se bude počítat z členu Fe^{ikl} (lze také použít jednodušší

⁷Při bližším pohledu zjistíme, že se vlastně jedná o dvě soustavy dvou rovnic, takže její vyřešení není až tak obtížné.



Obrázek 3.5: Závislost koeficientů odrazu R a průchodu T na šířce bariéry a v případě, že $E > V_B$

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

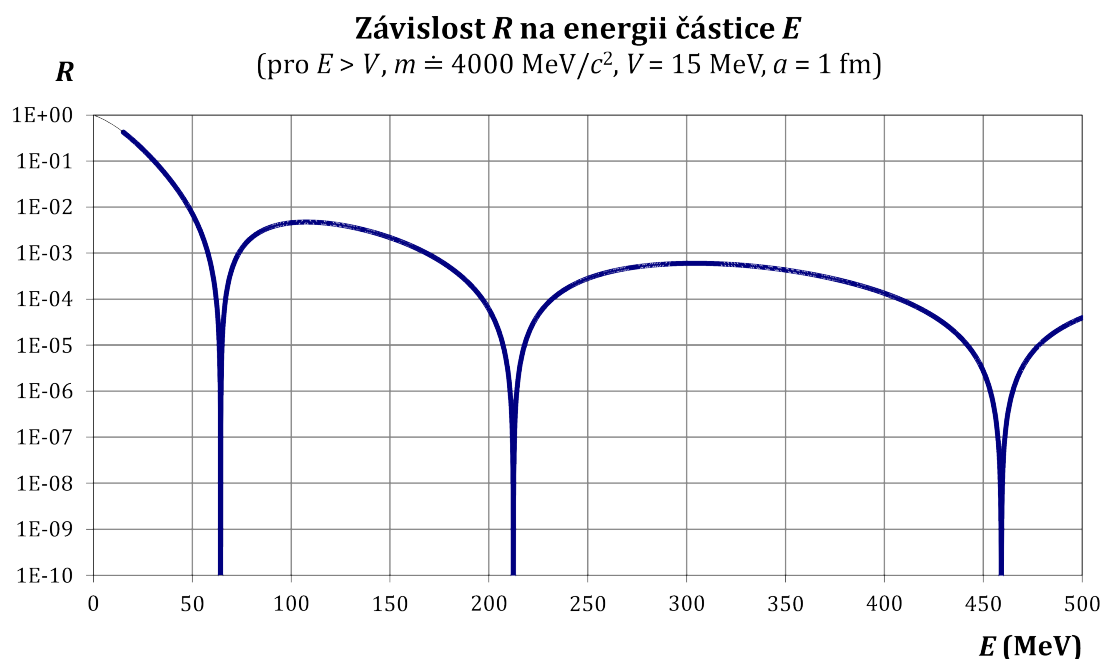
$$T = \frac{|j_T|}{|j_I|} = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \dots = \frac{4E(E - V_B)}{4E(E - V_B) + V_B^2 \sin^2(la)}.$$

Evidentně dostáváme výsledky, které nemají v klasické mechanice analogii. Předně – 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 jsou (la) -periodické; jejich průběh v závislosti na šířce bariéry a při pevném l ukazuje obr. 3.5. Z výrazu 3.7 je patrné, že pro $la = n\pi$ je $R = 0$. Jinými slovy, při vhodné energii částice E (připomeňme, že energie E vystupuje ve výrazu pro l) pro danou šířku bariéry a nedochází k odrazu částic, tyto energie se nazývají rezonanční. Závislost koeficientů odrazu R a průchodu T na šířce bariéry a na celkové energii částice je zachycena i v grafech na obr. 3.5 a 3.6.

Řešení bariéry pro $0 < E < V_B$

Situace je zachycena na obr. 3.4 vpravo. Řešení stacionární Schrödingerovy rovnice na intervalech $x < 0$ a $x > a$ jsou stejná jako v předchozím případě $E > V_B$. V intervalu



Obrázek 3.6: 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.)

$0 < x < a$ jsou pak řešením reálné exponenciály: $\psi = Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x}$, $\alpha = \sqrt{\frac{2m|E-V_B|}{\hbar^2}}$. 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 $x = 0$:

$$A + B = C + D$$

$$ikA - ikB = \alpha C - \alpha D$$

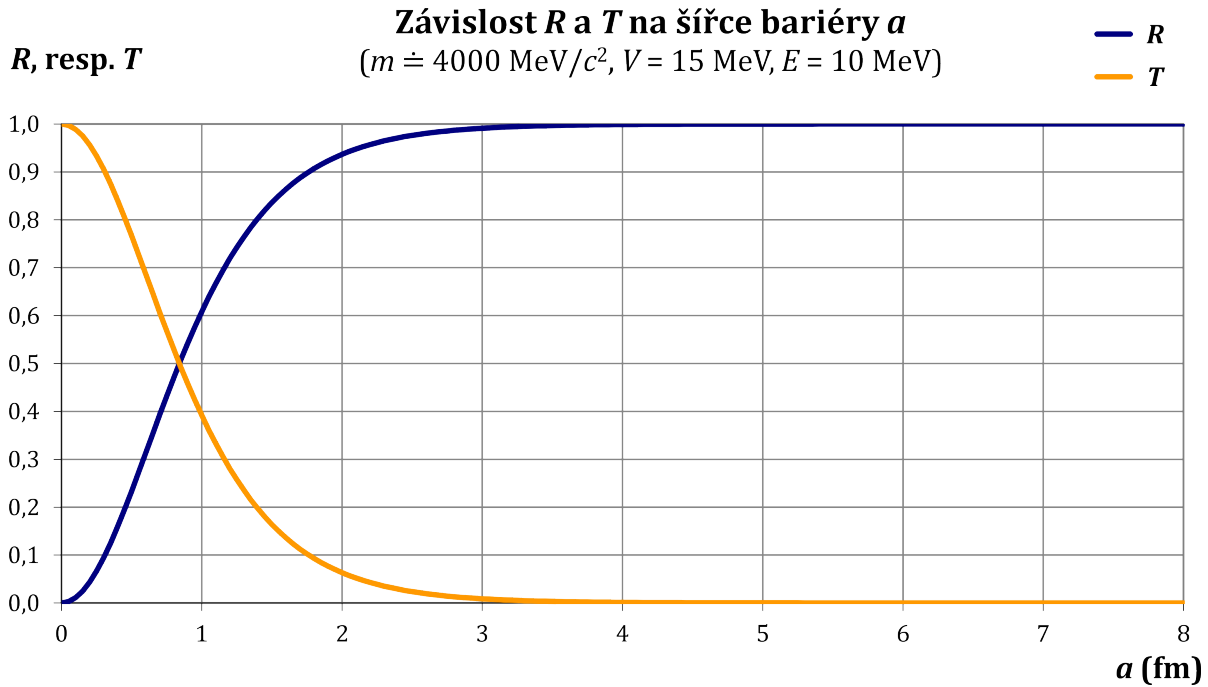
Pro $x = a$:

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

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

Podobně jako v předcházející podkapitole⁸ lze tuto soustavu čtyř rovnic o pěti neznámých vyřešit tak, že integrační konstanty A až D vyjádříme pomocí F a určíme koeficient odrazu

⁸Samozřejmě lze tento případ vyřešit samostatně. Je ale možná převzít řešení z předchozí část, pokud si uvědomíme, že sešívací podmínky se liší jen substitucí $il = \alpha$.



Obrázek 3.7: Koeficienty odrazu R a průchodu T v závislosti na šířce bariéry a pro případ $0 < E < V_B$

R a průchodu T

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

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

Graf na obr. 3.7 ukazuje závislost R a T na šířce bariéry a pro α částici s klidovou hmotností přibližně $4000 \text{ MeV}/c^2$ pro „výšku“ potenciálové bariéry $V = 15 \text{ MeV}$ a celkovou energii částice $E = 10 \text{ MeV}$. Průběh závislosti obou koeficientů je ale obdobný i pro jiné situace.

Pravděpodobnost odrazu T s tloušťkou bariéry klesá přibližně exponenciálně k nule, ale není nulová – jinými slovy, 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 (pozn. exponenciála je ve vztahu 3.9 „schována“ v hyperbolickém sinu), vede i přes nepříliš velké odlišnosti v parametrech potenciálové bariéry (její tloušťky a výšky) na okraji různých atomových jader

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 $4\text{--}7\cdot 10^{-10}$ m, je přiváděno elektrické napětí. Vzduchová 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 zůstal konstantní a určuje nám strukturu povrchu zkoumaného vzorku a to až do rozlišení na úrovni polohy či velikosti jednotlivých atomů.

Úkol 3.5 Určete 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 šířce 0,5 fm. (Poznámka: $\hbar \doteq 200$ MeV/fm.)

Úkol 3.6 Určete pravděpodobnost, že míč o hmotnosti 1 kg a rychlosti 1 m/s projde centimetrovou zdí, na jejíž „proražení“ by potřeboval energii 1 J.

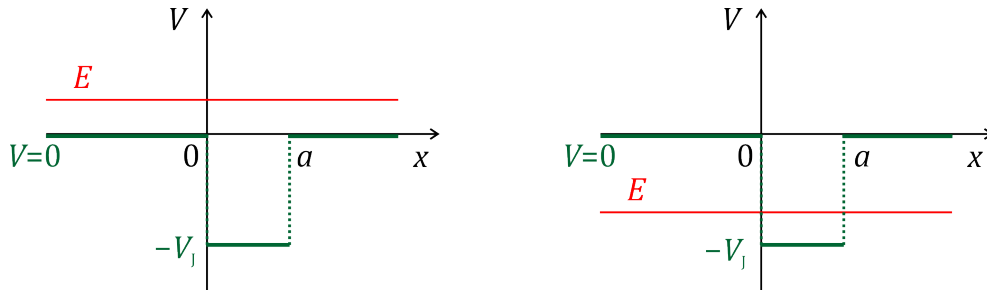
3.5 Pravoúhlá konečně hluboká potenciálová jáma

Až dosud jsem se zabývali problémy, ve kterých jsme dostávali fyzikálně přípustná řešení Schrödingerovy rovnice pro libovolnou hodnotu energie (případně omezení bylo na nějaký velký interval, např. že energie je kladná). Nyní se budeme věnovat částici v konečně hluboké potenciálové jámě.

Řešení pro $E > 0$

Situace je zachycena na obr. 3.8 vlevo pro konečnou pravoúhlou jámu šířky a . Protože se od řešení potenciálové bariéry v podstatě neliší,⁹ budeme se jí věnovat pouze velmi stručně. Řešení stacionární Schrödingerovy rovnice jsou

⁹Ve skutečnosti stačí v řešení pro $E > V_B$ nahradit výšku bariéry V_B její zápornou hodnotou a veškeré výsledky zůstanou v platnosti.

Obrázek 3.8: Vlevo situace pro $E > V$, vpravo pro $E < V$

- pro $x < 0$: $\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, kde $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$,
- pro $0 < x < a$: $\psi = Ce^{ilx} + De^{-ilx}$, kde $l = \sqrt{\frac{2m(E+|V_J|)}{\hbar^2}}$,
- pro $x > a$: $\psi = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}$, 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 doprava, tedy položíme $G = 0$. Po dořešení soustavy dané sešívacími podmínkami můžeme stanovit koeficienty R a T . Asi nás nepřekvapí nás, že stejně jako u potenciálového schodu či bariéry může docházet k odrazu i pro částice mající dostatečnou energii na průchod.

Řešení pro $-V_J < E < 0$

Mnohem zajímavější situaci dostaneme, pokud vyšetříme případ znázorněný na obr. 3.8 vpravo. Uvědomme si, že v klasickém případě by se částice pohybovala jen v intervalu $0 < x < a$, tj. uvnitř jámy.

Řešení stacionární Schrödingerovy rovnice zde dostává podobu:

- pro $x < 0$: $\psi = Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x}$, kde $\alpha = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$,
- pro $0 < x < a$: $\psi = Ce^{ikx} + De^{-ikx}$, kde $k = \sqrt{\frac{2m(|V_J| - |E|)}{\hbar^2}}$,
- pro $x > a$: $\psi = Fe^{\alpha x} + Ge^{-\alpha x}$, 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 $x \rightarrow \pm\infty$ divergovaly – proto je nezbytné, aby $B = F = 0$. Sešívací podmínky tím dostávají tvar:

Pro $x = 0$:

$$A = C + D$$

$$\alpha A = ikC - ikD$$

Pro $x = a$:

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

$$ikCe^{ika} - ikDe^{-ika} = -\alpha Ge^{-\alpha a}$$

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 „vázan na jámu“ a hovoříme o tzv. **vázaných stavech**.

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

Předchozí případ lze řešit matematicky mírně odlišně. Položíme pouze $B = 0$ a s integrační konstantou F budeme počítat, s tím, že máme na paměti, že fyzikálně jsou přípustná, pouze ta řešení, kdy nám vyjde $F = 0$. V takovém případě dostaneme sešívací podmínky ve tvaru:

Pro $x = 0$:

$$A = C + D$$

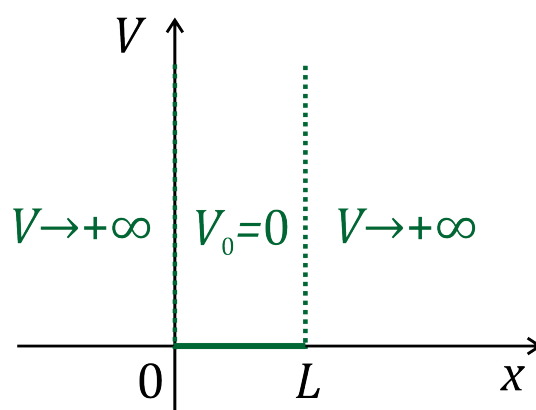
$$\alpha A = ikC - ikD$$

Pro $x = a$:

$$Ce^{ika} + De^{-ika} = Fe^{\alpha a} + Ge^{-\alpha a}$$

$$ikCe^{ika} - ikDe^{-ika} = \alpha Fe^{\alpha a} - \alpha Ge^{-\alpha a}$$

což jsou 4 rovnice pro pět neznámých integračních konstant. Například konstantu A můžeme zvolit jako parametr a pomocí ní nejprve vyjádřit C a D použitím podmínek v bodě $x = 0$ a potom pomocí A vyjádřit i hodnoty konstant F a G využitím sešívacích podmínek v bodě $x = a$. Potom položením $F = 0$ dostaneme podmínku pro přípustné energie E (ty jsou obsaženy ve vyjádření k a α) a získat tak kvantování energie.



Obrázek 3.9: Pravoúhlá nekonečná potenciálová jáma

3.6 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 $V(x) \rightarrow +\infty$; jinými slovy, skok potenciální energie v bodech $x = 0$ a $x = L$ je nekonečný¹⁰ (viz obr. 3.9).

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 „vykompenzovali“ 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 našli 3.3 ve tvaru:

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad \text{kde } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (3.10)$$

¹⁰Asi 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. se zajímáme 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, které budou zmíněny dále v textu.

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:

- 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, slevíme¹¹ z obvyklých požadavků na vlnovou funkci a v místech nekonečných skoků potenciální energie budeme vyžadovat pouze její spojitost vlnové funkce. 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

$$kL = n\pi, \tag{3.11}$$

kde n je tzv. **kvantové číslo**¹² 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, tak vidíme, že všechny fyzikálně přípustné stavy popisují vlnové funkce pro $n = 1, 2, 3, \dots$. Nalezená n -tá stacionární funkce má tvar:

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

Vyjádřením k ze vztahů 3.10 a 3.11 a jejich následným porovnáním dostáváme vztah pro vlastní čísla hamiltoniánu, tj. experimentálně naměřitelné hodnoty celkové energie E pro částici v nekonečně hluboké pravoúhlé potenciálové jámě:

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

¹¹Oprávněnost takového ústupku lze zdůvodnit dvěma různými způsoby – jednak takto dostaneme řešení, které dobře popisuje případy, které se blíží zvolenému modelu. Druhý způsob, jak k tomu je přistoupit je situace, kdy nekonečnou jámu budeme chápat jako limitní případ konečné jámy, pokud bychom zvětšovali její hloubku. Potom pokud provedeme limitní přechod i ve vlnových funkcích, tak dostaneme tato řešení, která budou sice spojit, ale nikoli hladká.

¹²Jako kvantové číslo či kvantová čísla budeme označovat jakákoli čísla, která použijeme k „očíslování“ jednotlivých řešení stacionární Schrödingerovy rovnice.

Index n u energie značí, které stacionární vlnové funkce daná energie přísluší. Vidíme, že důsledkem požadavků na spojitost a normovatelnost vlnové funkce je kvantování energie uvnitř jámy.

Výpočtová úloha 3.3

Pro nalezené stacionární vlnové funkce $\psi_n = D \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$ určete normovací konstantu D .

Řešení:

Funkci ψ_n dosadíme do normovací podmínky 2.4 a druhou mocninu funkce sinus přepíšeme pomocí dvojnásobného úhlu:

$$1 = \int_0^L \psi_n^* \psi_n dx = |D|^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = \frac{1}{2}|D|^2 \int_0^L \left(1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)\right) dx.$$

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

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

Dosažením integračních mezí zjistíme, že celý 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 a jejich energií E_n :

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

Výpočtová úloha 3.4

Ověřte ortonormalitu báze tvořené vlastními funkcemi ψ_n , kde $n = 0, 1, 2, \dots$

Řešení:

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

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

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

$$\langle \psi_k | \psi_l \rangle = \frac{1}{L} \int_0^L \left(\cos\frac{(k-l)\pi x}{L} - \cos\frac{(k+l)\pi x}{L} \right) dx. \quad (3.12)$$

Pro $k = l$ dostáváme integrál 3.12 ve tvaru (druhý integrál dává nulu po dosazení obou mezí, protože v argumentu sinu je násobek π):

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

Pro $k \neq l$ integrujeme 3.12 takto:

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

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

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

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

Úkol 3.7 Napište vlnovou funkci částice v nekonečně hluboké potenciálové jámě, která je v takovém stavu, že pravděpodobnost naměřené energie E_1 je $p(E_1) = 50\%$, pravděpodobnost naměření energie E_2 je $p(E_2) = 20\%$ a energie E_3 je $p(E_3) = 30\%$.

Úkol 3.8 Napište časový vývoj vlnové funkce pro částici ve stavu ψ_n .

Zapište řešení nestacionární (časové) Schrödingerovy rovnice.

Řešení:

Časový vývoj stacionární vlnové funkce je

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

Řešení pro nestacionární Schrödingerovu rovnici má tvar

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

Úkol 3.9 Částice v nekonečně hluboké jámě byla v čase $t = 0$ popsána vlnovou funkcí

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

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

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} , \hat{x}^2 , \hat{p} , \hat{p}^2 ve stacionárním stavu popsaném funkcí ψ_n . Odtud dopočítejte neurčitosti

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

a porovnejte s Heisenbergovou relací neurčitosti.

Řešení:

$$\langle \hat{x} \rangle_{\psi_n} = \frac{L}{2}$$

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

$$\langle \hat{p} \rangle_{\psi_n} = 0$$

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

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

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

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

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

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

kde koeficienty c_n představují odmocninu z pravděpodobnosti naměření vlastního čísla E_n . Klíčem k zodpovězení obou otázek je tedy právě nalezení koeficientů c_n , které s využitím ortonormality báze vlastních funkcí snadno získáme jako:

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

Řešení:

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

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

$$\begin{aligned} c_n &= \langle \Psi | \psi_n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \psi_n dx = \int_0^L \sqrt{\frac{30}{L^5}} x(L-x) \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = \\ &= \frac{\sqrt{60}}{L^3} \left\{ L \int_0^L x \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx - \int_0^L x^2 \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx \right\}. \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \int_0^L x \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx &= -\frac{L^2}{n\pi}(-1)^n, \\ \int_0^L x^2 \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx &= -\frac{L^3}{n\pi}(-1)^n + \frac{2L^3}{n^3\pi^3} [(-1)^n - 1]. \end{aligned}$$

Finálními úpravami nakonec získáme:

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

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

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

c) Pravděpodobnost p_n naměření vlastního čísla E_n je:

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

Povšimněte si, že pro lichá 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.

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

3.7 Lineární harmonický oscilátor (LHO)

Řešení tohoto problému je poměrně dlouhé, proto je rozděleno 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 x_0 . Protože předpokládáme, že potenciální energie je funkcí spojitou a hladkou, lze ji v okolí bodu x_0 rozvinout pomocí Taylorovy řady

$$V(x) = V(x_0) + \frac{dV}{dx}(x_0)(x-x_0) + \frac{1}{2} \frac{d^2V}{dx^2}(x_0)(x-x_0)^2 + \frac{1}{6} \frac{d^3V}{dx^3}(x_0)(x-x_0)^3 + \dots \quad (3.13)$$

Nyní výraz 3.13 několika kroky zjednodušíme:

- Volnost volby nulové hladiny potenciální energie umožňuje položit $V(x_0) = 0$.
- Bez újmy na obecnosti uvažujeme $x_0 = 0$ (jedná se o jednoduchou transformaci souřadnic).
- Protože určujeme hodnotu derivace $\frac{dV}{dx}$ 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 3.13 se těmito kroky redukuje na:

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

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

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

Vyčíslená druhá derivace v bodě $x_0 = 0$ 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:

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi &= E\psi, \\ (\hat{T} + \hat{V})\psi &= E\psi, \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi &= E\psi, \\ -\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\psi &= \frac{2mE}{\hbar^2}\psi.\end{aligned}\tag{3.14}$$

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 3.14 přejdeme k bezrozměrné souřadnici, tzv. charakteristické délce ξ :

$$\xi = \frac{x}{x_0},\tag{3.15}$$

kde x_0 je vhodně zvolená konstanta. Abychom mohli v rovnici 3.14 tuto substituci provést, je třeba nejdříve najít vztah mezi derivací podle x a ξ :

$$\begin{aligned}\frac{d\psi(\xi)}{dx} &= \frac{d\psi(\xi)}{d\xi} \cdot \frac{d\xi(x)}{dx} = \frac{1}{x_0} \frac{d\psi(\xi)}{d\xi}, \\ \frac{d^2\psi(\xi)}{dx^2} &= \frac{1}{x_0} \frac{d}{dx} \left(\frac{d\psi(\xi)}{d\xi} \right) = \frac{1}{x_0} \frac{d}{d\xi} \left(\frac{d\psi(\xi)}{d\xi} \right) \cdot \frac{d\xi(x)}{dx} = \frac{1}{x_0^2} \frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2}.\end{aligned}$$

V bezrozměrné souřadnici ξ tak dostává naše rovnice 3.14 podobu:

$$-\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x_0^4\xi^2\psi = \frac{2mEx_0^2}{\hbar^2}\psi.\tag{3.16}$$

Pro zjednodušení rovnice 3.16 zvolíme hodnotu konstanty x_0 :

$$x_0^2 = \frac{\hbar}{m\omega}.\tag{3.17}$$

Současně označíme jako ε :

$$\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}. \quad (3.18)$$

Po dosazení obou vztahů do 3.16 a drobné úpravě získáváme:

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} - (\xi^2 - \varepsilon)\psi = 0. \quad (3.19)$$

4. Asymptotické řešení.

Rovnice 3.19 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:

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} - \xi^2\psi = 0. \quad (3.20)$$

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

5. Přesné řešení.

Výše získané asymptotické řešení je vodítkem k tomu, v jaké podobě hledat přesné řešení rovnice 3.19 – budeme jej uvažovat ve tvaru:

$$\psi(\xi) = u(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad (3.21)$$

kde $u = u(\xi)$ je zatím blíže neurčená funkce modifikující klesající exponenciálu zejména pro malé hodnoty ξ . Tento tvar řešení dosadíme do rovnice 3.19 a upravíme. Pro zpřehlednění zápisu nebudeme u veličin uvádět proměnné a derivaci podle ξ budeme teď značit čárkou:

$$\begin{aligned} \psi'' - (\xi^2 - \varepsilon)\psi &= 0, \\ (ue^{-\frac{\xi^2}{2}})'' - (\xi^2 - \varepsilon)ue^{-\frac{\xi^2}{2}} &= 0, \\ (u'e^{-\frac{\xi^2}{2}} - u\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}})' - (\xi^2 - \varepsilon)ue^{-\frac{\xi^2}{2}} &= 0, \\ u''e^{-\frac{\xi^2}{2}} - u'\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}} - u'\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}} - ue^{-\frac{\xi^2}{2}} + u\xi^2 e^{-\frac{\xi^2}{2}} - (\xi^2 - \varepsilon)ue^{-\frac{\xi^2}{2}} &= 0. \end{aligned}$$

¹⁴Pozor, pokud vlnovou funkci $\psi = Be^{-\frac{\xi^2}{2}}$ dosadili do rovnice 3.20, 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 $\xi \rightarrow \pm\infty$, kde skutečně $\lim_{\xi \rightarrow \pm\infty} -Be^{-\frac{\xi^2}{2}} = 0$.

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

$$u'' - 2u'\xi + (\varepsilon - 1)u = 0. \quad (3.22)$$

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

$$u = \sum_{l=0}^{\infty} a_l \xi^l. \quad (3.23)$$

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 3.22:

$$\sum_{l=0}^{\infty} (a_{l+2}(l+2)(l+1)\xi^l - 2a_{l+1}(l+1)\xi^{l+1} + (\varepsilon-1)a_l\xi^l) = 0. \quad (3.24)$$

Abychom dostali ve všech členech výrazu 3.24 stejnou mocninu u ξ , posuneme v prostředním členu sčítací index: $(l+1) \rightarrow l$. Člen se tím nijak nezmění, neboť v něm takto přibude jen nulový sčítanec $2a_0 \cdot 0 \cdot \xi^0$. Sumu 3.24 pak lze zjednodušit:

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

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 :

$$a_{l+2} = a_l \frac{2l - \varepsilon + 1}{(l+2)(l+1)}. \quad (3.25)$$

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 3.23 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 3.19. Tato vlnová funkce je sudá, neboť v řadě 3.23 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 3.23 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 3.23 s koeficienty danými vztahem 3.25 je v tom, že pokud je tato řada nekonečná, chová se pro $l \rightarrow \infty$ jako funkce e^{ξ^2} . Tím je podle vztahu 3.21: $\psi(\xi) = e^{\xi^2} e^{-\frac{\xi^2}{2}} = e^{\frac{\xi^2}{2}}$, což je funkce, která není normovatelná, a tudíž nemůže být vlnovou funkcí. Nezbývá tedy, než zajistit, aby řada 3.23 měla nenulový pouze konečný počet členů, což je splněno, pokud pro určité $l = n$ bude platit:

$$a_{n+2} = 0 \Rightarrow \varepsilon = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.26)$$

Vzhledem k tvaru rekurentního vztahu 3.25 lze volbou energie E (respektive její bezrozměrné varianty ε) ukončit rozvoj buď pouze sudých, nebo pouze lichých členů řady 3.23. 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} . Pojd'me si to dokázat.

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

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

kam dosadíme $x = \xi^2$ a dostaneme

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

Pro posouzení asymptotického chování spočteme podíl dvou sousedních nenulových koeficientů rozvoje

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

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

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

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

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

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 3.26. Za ϵ nyní dosadíme ze substituce 3.18 a dostáváme:

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

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

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.27)$$

Stojí za povšimnutí, že energetické spektrum dané vztahem 3.27 je **ekvidistantní**

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

Energie základního stavu¹⁵ ($n = 0$) 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 model LHO k modelování kmitů částic v krystalické mřížce, protože do základního stavu se dostanou všechny částice při teplotě $T = 0$ K, tj. jedná se o „kmity“, které probíhají i při nulové teplotě.

¹⁵Základní stav je stav s nejmenší možnou energií.

9. Stacionární vlnové funkce.

Vlastním číslem energie E_n daným podmínkou 3.27 přísluší podle vztahu 3.21 vlastní (stacionární) vlnové funkce:

$$\psi_n = u_n(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \quad (3.28)$$

Polynomy $u_n(\xi)$ vzniklé pro dané n omezením řady 3.23 se nazývají **Hermitovy polynomy** stupně n a označují se jako $H_n(\xi)$ a platí pro ně například vztah

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} \left(e^{-\xi^2} \right). \quad (3.29)$$

Stacionární vlnová funkce ψ_n má potom tvar

$$u_n(\xi) = A_n H_n(\xi), \quad (3.30)$$

kde A_n je normovací konstanta n -té stacionární vlnové funkce

$$A_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}}. \quad (3.31)$$

Celková podoba vlnových funkcí ψ_n v proměnné ξ , kterou „poskládáme“ pomocí vztahů 3.28, 3.30 a 3.31 tedy je:

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.32)$$

Pokud přejdeme zpět k proměnné x (pomocí substituce 3.15) získáme **finální tvar stacionárních vlnových funkcí pro lineární harmonický oscilátor**:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \frac{1}{\sqrt{x_0}} H_n \left(\frac{x}{x_0} \right) e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.33)$$

Povšimněme si, že použitím substituce se změnila normovací konstanta o člen obsahující x_0 (viz vztah 3.17).

Úkol 3.10 Dosazením do vztahu 3.29 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 3.11 Ukažte kolmost vlastních funkcí ψ_0 a ψ_1 .

Úkol 3.12

- A. Napište vlnovou funkci odpovídající částici v základním stavu. (Vyjděte ze vztahu 3.33.)
- 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.

Řešení:

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \psi_n(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \frac{1}{\sqrt{x_0}} H_n \left(\frac{x}{x_0} \right) e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} e^{\frac{E_n t}{i\hbar}} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}} x_0} H_n \left(\frac{x}{x_0} \right) e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} e^{-i\omega t(n+\frac{1}{2})}. \end{aligned}$$

D. Obecné řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice

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

Výpočtová úloha 3.7

Pro základní stav částice v LHO ověřte relaci neurčitosti.

Řešení:

Výsledky:

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle_{\psi_0} &= \langle \hat{p} \rangle_{\psi_0} = 0 \\ \langle \hat{x}^2 \rangle_{\psi_0} &= \frac{x_0^2}{2} = \frac{\hbar}{2m\omega}, \quad \langle \hat{p}^2 \rangle_{\psi_0} = \frac{\hbar^2}{2x_0^2} = \frac{1}{2}m\hbar\omega. \\ \delta x \delta p &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{\frac{1}{2}m\hbar\omega} = \frac{\hbar}{2} \geq \frac{\hbar}{2}. \end{aligned}$$

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

3.8 Volná částice, řešení ve tvaru vlnového klubka

3.9 Separace proměnných – převod vícerozměrných úloh na jednorozměrné