

2. Jednorozměrné pravouhlé potenciály

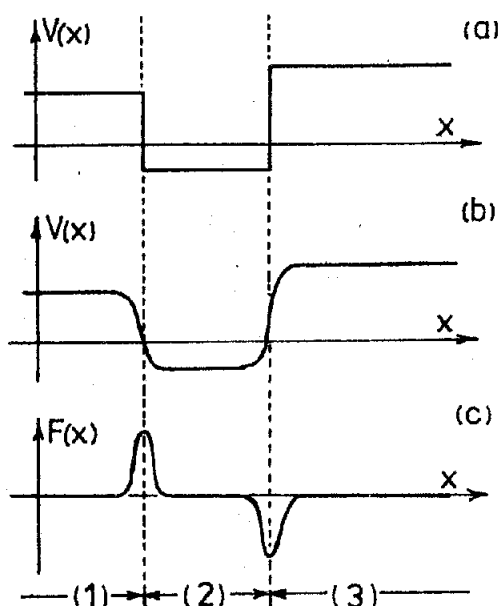
2.1) Fyzikální smysl pravouhlých potenciálů

Abychom se blíže seznámili s řešením Schrödingerovy rovnice a interpretací získaných výsledků, rozebereme si podrobně několik jednoduchých jednorozměrných úloh. Částice se v nich nachází stále na přímce, kterou zvolíme za osu x . Z matematického hlediska mají jednorozměrné úlohy tu přednost, že stacionární Schrödingerova rovnice (16) je pro ně obyčejnou (nikoliv parciální) diferenciální rovnicí; po malé úpravě ji můžeme psát

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \psi(x) = 0 \quad (20)$$

Řešení takové rovnice je mnohem prostší, než řešení parciálních diferenciálních rovnic, které dostáváme v 2- a 3-rozměrných úlohách. Jednorozměrné úlohy však jsou zajímavé nejen proto, že nám dovolují poznat základní charakteristické rysy kvantových jevů, které se zachovávají i v mnohem složitějších případech, ale i proto, že mnoho vícerozměrných úloh může být, po vhodné transformaci a separaci proměnných (viz odst. 1.3), redukováno na řešení několika rovnic, podobných rovnici (20).

Průběh potenciálů, které budeme uvažovat, je schematicky znázorněn na obr. 22a : osa x je rozdělena na několik oblastí, v nichž je potenciál



Obr. 22.

(a) Pravouhlý potenciál aproximující reálný průběh (b).

(c) Schematické znázornění síly

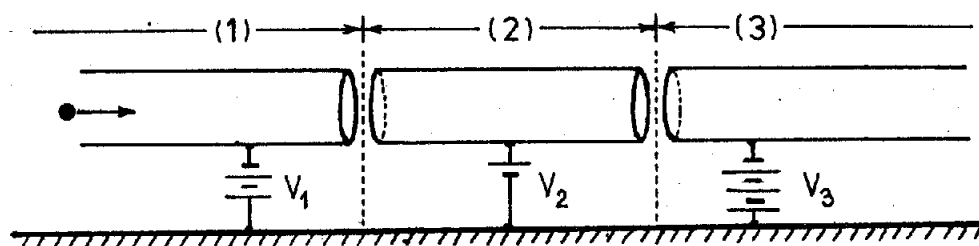
$$F(x) = - \frac{dV(x)}{dx}$$

působící na částici v poli (b).

konstantní a na styku těchto oblastí se mění skokem (nespojité). Pocho-
 pitelně, že taková funkce nepředstavuje reálný průběh potenciálu, který
 musí být spojitý, jako např. na obr. 22b. Jsou-li však rozměry oblastí,

v nichž dochází ke změně potenciálu, velmi malé, ve srovnání s ostatními délkovými rozměry vystupujícími v úloze (konkrétně např. v porovnání s de Broglieho vlnovou délkou), je pravoúhlý potenciál dobrou aproximací. Přestal by jí však být např. v případě částice s velkou energií, již přísluší de Broglieho vlnová délka srovnatelná s rozměry přechodné oblasti.

Chování klasické částice v potenciálním poli podle obr.22 je snadné předpovědět. Jestliže by $V(x)$ byla např. potenciální energií částice v gravitačním poli na povrchu Země, potom obr.22b představuje přímo profil terénu, v němž se částice pohybuje. Při dané celkové energii E ($E=T+V$ se zachovává) budou pro částici nedostupné ty oblasti na ose x , v nichž je $V > E$ (kinetická energie $T=mv^2/2$ musí být vždy ≥ 0). Tam kde je $V(x)$ konstantní, nebudou na částici působit žádné síly a bude se proto pohybovat rovnoměrně, s rychlostí $v=\sqrt{2(E-V)/m}$. Síla bude na částici působit jen v přechodových oblastech (obr.22c). Jiná možnost realizace průběhu $V(x)$ pomocí elektrostatických polí je na obr. 23.



Obr. 23. Elektrostatická realizace průběhu potenciální energie podle obr. 22b, pomocí kovových trubíc, které mají konstantní potenciál proti zemi (společnému bodu).

2.2) Optická analogie

K získání představy o řešení Schrödingerovy rovnice (20) může být někdy užitečná skutečnost, že formálně analogická rovnice popisuje jev, který můžeme poměrně dobře pozorovat: šíření světla v prostředí s proměnlivým indexem lomu.

V transparentním (tj. neabsorbujícím) prostředí, s prostorově i časově konstantním indexem lomu n , se může šířit elektromagnetická vlna ve směru osy x , přičemž její elektrická složka $\vec{E}(\vec{r}, t)$ nezávisí na y a z . Pro intenzitu elektrického pole tedy platí

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{e} E(x) \cdot e^{-i\omega t} \quad (21)$$

kde \vec{e} je jednotkový polarizační vektor kolmý k ose x , ω je kruhová frekvence a $E(x)$ vyhovuje rovnici (získá se z Maxwellových rovnic [4])

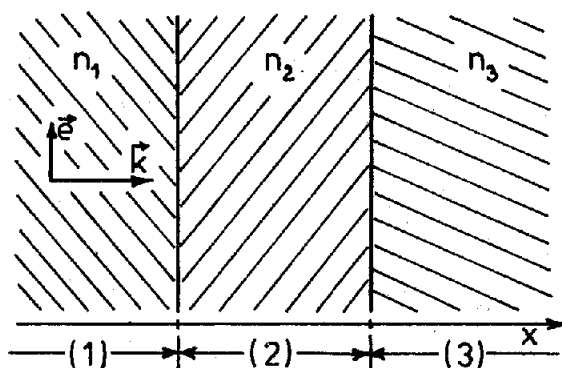
$$\frac{d^2 E(x)}{dx^2} + \frac{n^2 \cdot \omega^2}{c^2} E(x) = 0 \quad (22)$$

Rovnice (20), (22) budou z matematického hlediska identické, jestliže položíme (v (20) předpokládáme $V(x) = \text{const}$)

$$\frac{2m}{\hbar^2} [E - V] = \frac{n^2 \cdot \omega^2}{c^2} \quad (23)$$

Na řešení obou rovnic jsou navíc kladeny stejné požadavky: v místech nespojitosti $V(x)$ musí být $\psi(x)$ ($\hat{E}(x)$) funkce spojitá i s 1. derivací. Pohybu částice, v poli podle obr. 22a, pak odpovídá šíření elektromagnetické vlny v prostředí s nespojitou změnou indexu lomu ve směru šíření vlny (obr. 24). Podle (23) jsou mechanické a optické parametry svázány vztahem

$$n(\omega) = \frac{1}{\hbar \omega} \sqrt{2mc^2 [E - V]} \quad (24)$$



Obr. 24.

Optická analogie: elektromagnetická vlna s vlnovým vektorem \vec{k} se šíří ve směru osy x v prostředí, jehož index lomu se mění skokem v rovinách kolmých k ose x .

Oblasti, v nichž $E > V$, odpovídají v optické analogii transparentnímu prostředí, neboť index lomu n je zde reálný; vlna má pak tvar

$$\hat{E}(x) \approx e^{ikx}.$$

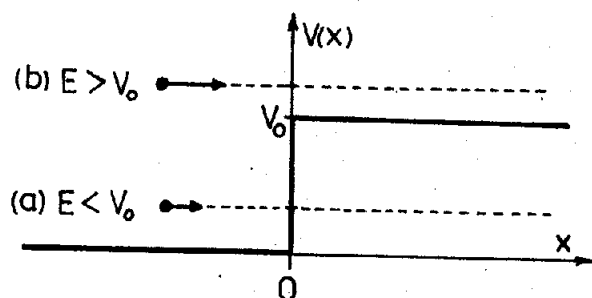
Oblastem, v nichž $E < V$, by odpovídalo prostředí s čistě imaginárním indexem lomu. Řešením rovnice (22) přitom je tlumená vlna

$\hat{E}(x) \approx e^{-qx}$ ($q > 0$, reálné). Do jisté míry podobná situace nastává při šíření elektromagnetické vlny v kovu (index lomu kovu však má reálnou i imaginární část).

Při využívání optické analogie je nutné mít stále na paměti, že vyplývá pouze z matematické shody rovnic (20), (22). Interpretace řešení, které získáme pro vlnovou funkci $\psi(x)$, se však diametrálně liší od interpretace $\hat{E}(x)$ v klasické optice.

2.3) Potenciálový val. Tok pravděpodobnosti

Nechť se podél osy x mění potenciál podle obr. 25 a částice s celkovou energií E postupuje zleva doprava.



Obr. 25 .

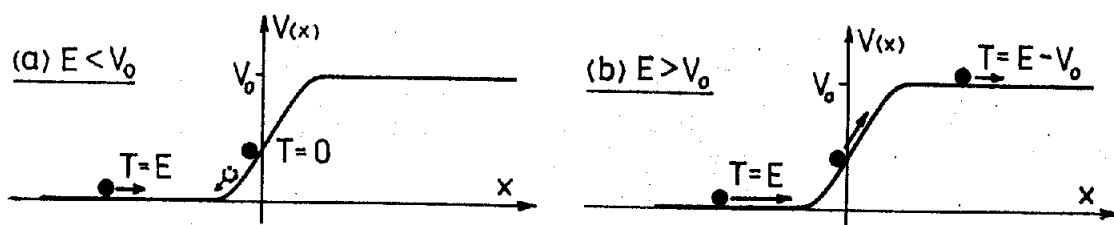
Potenciálový val.

Pro $x < 0$ je $V(x) = 0$, pro $x > 0$ je $V(x) = V_0$.

Uvažujme nejprve, jak by se chovala částice z hlediska klasické mechaniky. Mohou nastat dva případy :

(a) $E < V_0$ (obr.26a)

Částice vystoupí do místa, kde se celá její energie změní v energii potenciální (tzv. bod obratu), zastaví se ($T=0$) a začne se pohybovat zpět do oblasti $x < 0$. Oblast $x > 0$ je pro ni zcela nedostupná.



Obr. 26. Ke klasickému řešení pohybu částice. Pro větší názornost kreslíme reálný průběh $V(x)$, který v limitě přejde ve skok potenciálu podle obr.25. Bod obratu jsme v případě (a) položili do $x=0$.

(b) $E > V_0$ (obr.26b)

Částice vystoupí až do oblasti, kde $V(x) = V_0$ a postupuje dále původním směrem s rychlostí $v = \sqrt{2(E - V_0)}/m$. Potenciálový val nikdy neobrátil směr jejího pohybu.

Kvantově-mechanické řešení

Protože potenciální energie $V(x)$ je nezávislá na čase, stačí řešit stacionární Schrödingerovu rovnici (20) a získat tak prostorovou část $\varphi(x)$ vlnové funkce (18). Vzhledem k nespojitosti funkce $V(x)$ v bodě $x = 0$, vyhovuje $\varphi(x)$ rovnici:

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi(x) = 0 \quad \text{pro } x < 0 \quad (25a)$$

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \varphi(x) = 0 \quad \text{pro } x > 0 \quad (25b)$$

I když potenciální energie $V(x)$ je v bodě $x=0$ nespojitá, musí hledaná vlnová funkce $\varphi(x)$ mít v celém intervalu $(-\infty, +\infty)$ vlastnosti uvedené v odst. II.3.4; mimo jiné, musí být všady spojitá i s 1.derivací. To znamená, že musíme najít taková řešení rovnic (25), která v bodě $x=0$

na sebe spojitě navazují i s 1.derivací. Opět rozdělíme řešení na dva případy:

(a) Celková energie částice $E < V_0$.

Rovnice (25) jsou obyčejné homogenní (bez pravé strany) diferenciální rovnice 2.řádu s konstantními koeficienty. Jejich řešení hledáme standardním postupem:

(i) předpokládáme řešení ve tvaru

$$\psi(x) = e^{\alpha x}, \text{ kde } \alpha \text{ je dosud neurčené číslo,}$$

(ii) dosadíme toto předpokládané řešení do (25) a po vydělení $e^{\alpha x}$ dostaneme tzv. charakteristické rovnice:

$$\alpha^2 + k^2 = 0, \quad \text{kde } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (26a)$$

$$\alpha^2 + q^2 = 0, \quad \text{kde } q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (26b)$$

které mají řešení

$$\alpha_{1,2} = \pm ik \quad \text{pro } x < 0 \quad (26c)$$

$$\alpha_{1,2} = \pm q \quad \text{pro } x > 0 \quad (26d)$$

Obecná řešení rovnic (25) tudíž jsou

$$\psi(x) = A \cdot e^{ikx} + B \cdot e^{-ikx} \quad \text{pro } x < 0 \quad (27a)$$

$$\psi(x) = C \cdot e^{qx} + D \cdot e^{-qx} \quad \text{pro } x > 0 \quad (27b)$$

kde

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0 \quad \text{a} \quad q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} > 0 \quad (27c)$$

Zatím neurčené konstanty A, B, C, D stanovíme z okrajových podmínek, které nám vyplynou z obecných požadavků kladených na vlnové funkce (odst.II.3.4).

V našem případě použijeme tyto:

(i) $\psi(x)$ musí být všady (tj. pro $x \in (-\infty, +\infty)$ konečná; v řešení (27b) pro $x > 0$ musí tedy být $C = 0$, neboť jinak by pro $x \rightarrow \infty$ rostla $\psi(x)$ nad všechny meze;

(ii) v bodě $x=0$ musí řešení (27a) spojitě navazovat i s 1.derivací na řešení (27b). Vyjádříme-li tyto podmínky (C již klademe rovno nule), dostaneme rovnice:

$$A + B = D \quad (\text{z rovnosti funkcí v } x = 0) \quad (28a)$$

$$ik(A - B) = -qD \quad (\text{z rovnosti 1.derivací v } x=0) \quad (28b)$$

To jsou 2 rovnice pro 3 neznámé. Určíme z nich poměry

$$\frac{B}{A} = \frac{k - iq}{k + iq} \quad \frac{D}{A} = \frac{2k}{k + iq} \quad (29)$$

Řešení, které splňuje všechny podmínky, tedy je (rovnice (27) vydělíme A a dosadíme z (29) :

$$\varphi(x) = e^{ikx} + \left[\frac{1 - i\sqrt{V_0/E - 1}}{1 + i\sqrt{V_0/E - 1}} \right] e^{-ikx} \quad \text{pro } x < 0 \quad (30a)$$

$$\varphi(x) = \frac{2A}{1 + i\sqrt{V_0/E - 1}} \cdot e^{-qx} \quad \text{pro } x > 0 \quad (30b)$$

Podívejme se na výsledek z fyzikálního hlediska. Funkce $\varphi(x)$ pro $x < 0$ je superpozicí vlny postupující vpravo (e^{ikx}) a vlny postupující vlevo ($\sim e^{-ikx}$). V termínech kvantové mechaniky: vlnová funkce (30a) je superpozicí vlnové funkce pro stav s hybností $p = \hbar k$ (částice postupuje vpravo) a vlnové funkce pro stav s hybností $p = -\hbar k$ (částice postupuje vlevo)⁺. Z odst. II.4.3 víme, že kvadráty absolutní hodnoty koeficientů u vlnových funkcí v superpozici stavů jsou úměrné (není-li funkce normalizovaná) pravděpodobnosti nalezení částice v příslušném stavu. V našem případě:

$$\text{pro koeficient u } e^{ipx/\hbar} : |1|^2 = 1$$

$$\text{pro koeficient u } e^{-ipx/\hbar} : \left| \frac{1 - i\sqrt{V_0/E - 1}}{1 + i\sqrt{V_0/E - 1}} \right|^2 = 1$$

Skutečnost, že pravděpodobnosti jsou stejné, můžeme interpretovat tak, že částice přicházela zleva, na potenciálovém valu se odrazila a se stejně velkým, ale opačně naměřeným, impulsem (celková energie $E = p^2/2m$ se nezměnila) postupuje v oblasti $x < 0$ zprava doleva; dochází přitom k úplnému odrazu. Zavedeme-li, analogicky k optice (srov. odst.2.2)

koeficient odrazu

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} \quad (31)$$

je v tomto případě (tj. pro $E < V_0$) $R = 1$.

K získaným výsledkům dodejme ještě na vysvětlenou toto. Používané výroky jako: "vlna postupuje vpravo", "postupuje vlevo" apod. mají vlastně plný smysl pro úplnou vlnovou funkci (18), tj.

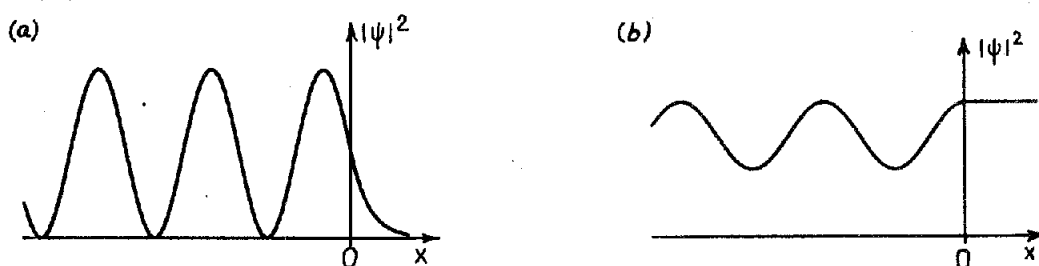
$$\psi(x,t) = \varphi(x) \cdot e^{-iEt/\hbar} \quad (32)$$

kde $\varphi(x)$ je funkce (30a).

⁺) Tvzení by bylo zcela přesné jen pro rovinnou vlnu e^{ikx} , resp. e^{-ikx} , rozprostírající se od $-\infty$ do $+\infty$. V našem případě je jen přibližné, neboť vlnová funkce má tento tvar pouze v oblasti $x < 0$; takovou vlnu získáme jako superpozici vln s impulsy blízkými uvedeným hodnotám p .

Rovněž prostorově lokalizovaný elektron, dopadající na potenciálový val a odražející se od něho, by měl být reprezentován lokalizovaným vlnovým klubkem; poněkud podrobněji se k takovému řešení vrátíme v odst. 2.6. Řešení, které zde uvádíme, je sice vzdálenější realitě, ale výsledky, které získáme pomocí jednoduché matematiky, jsou v hlavních rysech shodné; můžeme se na ně dívat jako na řešení pro tak široké vlnové klubko, že je dobře aproximováno vlnovou funkcí (27) (srov. II.4.2).

Podívejme se nyní do oblasti $x > 0$, kde je vlnová funkce dána výrazem (30b). Vidíme, že i v této oblasti - z hlediska klasické mechaniky zcela nedostupné - je nenulová pravděpodobnost výskytu částice. Amplituda vlnové funkce ovšem exponenciálně klesá, takže pravděpodobnost nalezení částice, ve větších vzdálenostech od potenciálového valu, bude prakticky nulová, v souladu se závěry klasické mechaniky. Získané závěry pro obě oblasti ilustruje obr.27a.



Obr. 27. Hustota pravděpodobnosti výskytu částice pro (a) $E = V_0/2$, (b) $E = 2V_0$. Všimněte si oscilujícího průběhu v oblasti $x < 0$, který nemá analogii v klasické mechanice a je výsledkem superpozice dopadající a odražené vlny.

Přirozeně může vzniknout myšlenka, zda výskyt částice v oblasti $x > 0$ nenarušil zákon zachování energie (z hlediska klasické mechaniky by musela být kinetická energie záporná, aby nebyl narušen zákon zachování energie). Ukážeme, že tomu tak není.

Jestliže realizujeme experiment, který nám prokáže výskyt částice v oblasti $x > 0$, potom částice již nebude ve stavu s $E < V_0$; měření polohy částice je nutně doprovázeno neurčitostí v její energii. Interval, v němž je pravděpodobnost výskytu částice výrazně nenulová (pro $x > 0$), má rozměr řádově q^{-1} . Jestliže tedy najdeme částici vpravo od bodu $x=0$, je lokalizována v oblasti $\Delta x \approx q^{-1}$. To má však za následek neurčitost hybnosti $\Delta p \approx \hbar/\Delta x \approx \hbar q$ a tudíž neurčitost v kinetické energii zhruba $[(\Delta p)^2/2m] > (\hbar^2 q^2/2m) = V_0 - E$. Konečná energie, která je rovna E + tato dodatečná kinetická energie (mající původ v lokalizaci částice), je tudíž tak velká, že již nemůžeme tvrdit, že celková energie částice je menší než V_0 . Jinými slovy: víme-li jistě, že částice je vpravo od $x = 0$, potom nemůžeme říci, že její energie je menší než V_0 .

Částice nemůže být lokalizována v oblasti $x > 0$ a současně mít přesně určenou energii $E < V_0$.

Nyní uvažme ještě řešení pro limitní případ $V_0 \rightarrow \infty$; i když je to případ fyzikálně nereálný, je výsledek jednoduchý a někdy použitelný jako přijatelná aproximace.

Jestliže při E pevném $V_0 \rightarrow \infty$, potom také $q \rightarrow \infty$; to znamená, že hloubka proniku do oblasti $x > 0$ jde k nule a z (30b) plyne, že také amplituda prošlé vlny $\varphi(x) \rightarrow 0$. Pro limitní případ $V_0 \rightarrow \infty$ tak dostaneme

$$\varphi(x) = e^{ikx} - e^{-ikx} \quad \text{pro } x < 0 \quad (33a)$$

$$\varphi(x) = 0 \quad \text{pro } x > 0 \quad (33b)$$

Přejdeme nyní k druhé alternativě:

(b) celková energie částice $E > V_0$

Řešení rovnic (25) bude nyní mít jak pro $x < 0$, tak i pro $x > 0$, oscilující charakter:

$$\varphi(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} \quad \text{pro } x < 0 \quad (34a)$$

$$\varphi(x) = C e^{ik_2 x} + D e^{-ik_2 x} \quad \text{pro } x > 0 \quad (34b)$$

kde

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0 \quad \text{a} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} > 0 \quad (34c)$$

Zde jsou na celé ose přijatelná vždy obě řešení, neboť jsou všady konečná. Která z nich použijeme, záleží na řešení úloze. Existují dvě možnosti:

(i) částice dopadá na potenciálový val zleva; potom v oblasti $x < 0$ bude existovat jak vlna dopadající ($A \neq 0$), tak i vlna odražená ($B \neq 0$), ale v oblasti $x > 0$ jen vlna postupující vpravo (nemá se již na čem odrážet), tzn.

$$C \neq 0, \quad D = 0$$

(ii) částice přichází k valu zprava; pro $x > 0$ bude existovat vlna dopadající ($D \neq 0$) i odražená ($C \neq 0$), zatímco pro $x < 0$ jen vlna prošlá (postupuje vlevo), takže

$$A = 0, \quad B \neq 0$$

Všimněme si blíže jen případu (i); poměry koeficientů B/A a C/A ($D=0$) určíme opět z podmínky spojitosti funkce a její 1. derivace v bodě $x = 0$. Obdržíme

$$\frac{B}{A} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \quad \frac{C}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \quad (35)$$

a dosazením do (34) (funkce dělíme $A \neq 0$)

$$\varphi(x) = e^{ik_1 x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1 x} \quad (x < 0) \quad (36a)$$

$$\varphi(x) = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2 x} \quad (x > 0) \quad (36b)$$

Vidíme, že i v tomto případě ($E > V_0$) dojde k částečnému odrazu na potenciálovém valu. Koeficient odrazu je opět dán výrazem (31)

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{|k_1 - k_2|^2}{|k_1 + k_2|^2} \quad (37)$$

Koeficient propustnosti (analogicky k optické definici) není roven $|C|^2 / |A|^2$. Abychom ho určili, musíme zavést nový pojem.

Tok pravděpodobnosti

Jestliže se pravděpodobnost výskytu částice v nějakém ohraničeném objemu s časem zmenšuje (zvětšuje), potom pravděpodobnost, že částice bude nalezena vně tohoto objemu, se musí o stejnou hodnotu zvětšit (zmenšit). Zachování pravděpodobnosti výskytu je nutnou podmínkou nerozpornosti pravděpodobnostní interpretace vlnové funkce. Tuto podmínku lze splnit, definujeme-li vektor hustoty toku pravděpodobnosti \vec{j} tak, aby spolu s hustotou pravděpodobnosti (II.19) - $\rho = \psi^* \psi$ - splňoval rovnici (definici "div" viz dod.E)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{j} = 0 \quad (38)$$

Tato rovnice je dobře známá jako rovnice kontinuity z hydrodynamiky a elektrodynamiky; v prvním případě vyjadřuje zákon zachování hmoty, v druhém zákon zachování náboje.

Vyjádření vektoru \vec{j} pomocí vlnové funkce získáme z časové Schrödingerovy rovnice (10). Pro jednoduchost to provedeme pro jednorozměrný případ; platí

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V \psi \quad (39a)$$

a rovnice komplexně sdružená

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi^*}{dx^2} + V \psi^* \quad (39b)$$

Vynásobíme-li rovnici (39a) zleva ψ^* a (39b) zprava ψ , rovnice odečteme a uvědomíme si, že platí identita

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

dostaneme

$$\frac{\partial(\psi^* \psi)}{\partial t} + \frac{d}{dx} \left[\frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right) \right] = 0 \quad (40)$$

V jednorozměrném případě se redukuje ($\vec{j} = (j_x, j_y, j_z)$)

$$\text{div } \vec{j} = \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z} \quad \text{pouze na } \frac{dj}{dx}, \text{ takže}$$

dostáváme, porovnáním (38) a (40), pro jednorozměrný případ hustotu toku pravděpodobnosti

$$j = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right) \quad (41)$$

Obdobným způsobem se pro trojrozměrný případ získá vektor hustoty toku pravděpodobnosti

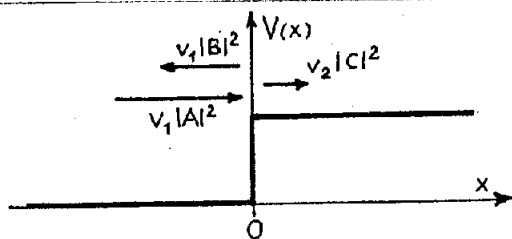
$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right) \quad (42)$$

Aplikujme nyní získané výsledky na vlnovou funkci (34) v níž $D=0$; dostaneme

$$j_1 = \frac{\hbar k_1}{m} (|A|^2 - |B|^2) \quad \text{pro } x < 0 \quad (43a)$$

$$j_2 = \frac{\hbar k_2}{m} |C|^2 \quad \text{pro } x > 0 \quad (43b)$$

Výrazy mají jednoduchou fyzikální interpretaci: jestliže podle de Broglieho vztahu chápeme $\hbar k_1/m = v_1$ jako rychlost částice v oblasti $x < 0$ a $\hbar k_2/m = v_2$ jako rychlost pro $x > 0$, potom (43a) lze považovat za výsledný tok v oblasti $x < 0$ a (43b) za tok vpravo od $x=0$ (obr.28)



Obr.28.

Toky hustoty pravděpodobnosti v místě potenciálového valu ($x=0$) pro vlnovou funkci (34) ($E > V_0$).

Pro stacionární stavy (přísluší jim vlnová funkce (18)) je

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

a rovnice kontinuity (38) se redukuje na

$$\text{div } \vec{j} = 0 \quad (44)$$

(v jednorozměrném případě to je $(dj/dx) = 0$).

Zavedeme koeficient propustnosti (podobně jako v optice)

$$T = \frac{j_1}{j_2} = \frac{k_2}{k_1} \frac{|C|^2}{|A|^2} \quad (45)$$

jako poměr prošlého ku dopadajícímu toku pravděpodobnosti. Po dosazení z (35)

$$T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \quad (46)$$

Součet koeficientu odrazivosti (37) a propustnosti (46) musí být roven 1; skutečně

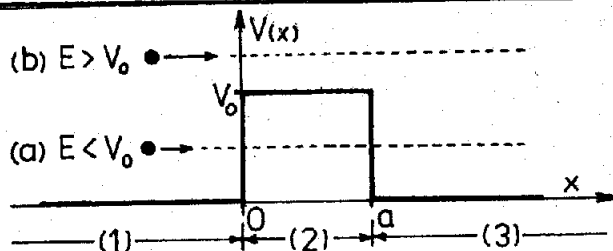
$$R + T = \frac{(k_1 - k_2)^2 + 4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = 1 \quad (47)$$

Znovu zdůrazněme, že odraz částice (s $E > V_0$) v místě prudké změny potenciálu (změna na vzdálenosti srovnatelné s de Broglieho vlnovou délkou) je čistě kvantově-mechanický jev, podmíněný vlnovým charakterem mikročástic. V klasické (částicové) mechanice nikdy nenastane (srov. obr. 26b). Lze však ukázat, že při pozvolné změně potenciálu (změna na vzdálenostech velkých ve srovnání s de Broglieho vlnovou délkou částice) je koeficient odrazu zanedbatelný, což je opět v souladu s principem korespondence.

Na závěr odstavce ještě k interpretaci hustoty toku pravděpodobnosti. Formální shoda rovnice (38) s rovnicí kontinuity v hydrodynamice, pochopitelně navozuje myšlenku, chápat \vec{j} jako hustotu toku částic. Je ovšem nutné vidět, že vektor \vec{j} není bezprostředně přístupný měření, tak jako např. hustota $\rho = \psi^* \psi$. Bylo by např. chybné, interpretovat $\vec{j}(\vec{r}, t)$ jako střední hodnotu toku částic v bodě \vec{r} v čase t , neboť měření střední hodnoty toku v daném bodě, předpokládá současně přesné určení souřadnice (polohy) a rychlosti (impulsu), což, jak víme z relací neurčitosti, nelze. Přesto je však často možné, především když \vec{j} závisí na \vec{r} málo nebo vůbec ne, chápat \vec{j} jako tok; v těchto případech je totiž možné určit dostatečně přesně rychlost (hybnost), aniž by se narušila představa o toku.

2.4) Potenciálová bariéra. Tunelový jev

Přejdeme nyní k úloze, v níž má potenciál skok ve dvou bodech; uvažovaný průběh je na obr. 29.



Obr. 29.

Pravouhlá potenciálová bariéra výšky V_0 a šířky a . Dopadající částice zleva má energii: (a) $E < V_0$ nebo (b) $E > V_0$.

Na základě poznatků z předcházejícího odstavce (a optické analogie v odst.2.2) je možné řešení odhadnout: k částečnému odrazu i průchodu bude docházet jak v $x=0$, tak v $x=a$. Na rozdíl od klasického řešení (srov.obr. 26), částice s celkovou energií $E < V_0$ bude mít nenulovou pravděpodobnost, že projde do oblasti na druhé straně bariéry. Skutečnost, že částice s celkovou energií $E < V_0$, může proniknout do oblasti ($x > a$), která je pro ni z hlediska klasické mechaniky nedostupná, se nazývá tunelový jev (mluví se též o "tunelování" částice). Využijeme-li výsledků z předcházejícího odstavce, můžeme formální řešení Schrödingerovy rovnice provést již velmi rychle. Stacionární Schrödingerova rovnice pro oblasti (1),(3) je (viz (25))

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi(x) = 0 \quad \text{pro } x < 0 \text{ a } x > a \quad (48a)$$

a pro oblast bariéry (2) je

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \varphi(x) = 0 \quad \text{pro } 0 < x < a \quad (48b)$$

Budeme předpokládat, že částice přichází k bariéře zleva (obr.29); rozlišit musíme opět dva případy:

(a) celková energie $E < V_0$ (obr.29a)

Obecné řešení Schrödingerovy rovnice (48) je (srov.(27)):

Oblast:

$$(1) \quad \varphi_1(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (x < 0) \quad (49a)$$

$$(2) \quad \varphi_2(x) = C e^{qx} + D e^{-qx} \quad (0 < x < a) \quad (49b)$$

$$(3) \quad \varphi_3(x) = E e^{ikx} + F e^{-ikx} \quad (x > a) \quad (49c)$$

kde opět

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0 \quad \text{a} \quad q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} > 0 \quad (49d)$$

Okrajové podmínky:

(i) Protože řešení (49b) použijeme jen v konečné oblasti $x \in (0, a)$, jsou pro tato x obě exponenty konečné, takže není důvod některou z nich vylučovat (jako jsme to udělali v předch.odst.), tzn., že obecně může být jak $C \neq 0$, tak i $D \neq 0$.

(ii) pro částici přicházející zleva může být v oblasti (3) pouze prošlá vlna postupující vpravo; proto je třeba položit

$$F = 0 \quad (50a)$$

(iii) výsledná vlnová funkce musí být spojitá i s 1.derivací v bodech $x = 0$, $x = a$; podmínka dá 4 rovnice

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad ; \quad \left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=0} \quad (50b)$$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a) \quad ; \quad \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=a} = \left. \frac{d\psi_3}{dx} \right|_{x=a} \quad (50c)$$

Dosazením do těchto rovnic z (49) (přičemž již $F=0$) dostaneme 4 rovnice pro 5 neznámých: A, B, C, D, E. Můžeme z nich jednoznačně určit poměry: B/A, C/A, D/A, E/A. Eliminací C/A, D/A dostaneme

$$\frac{B}{A} = \frac{-i(k^2 + q^2) \sinh(qa)}{2kq \cosh(qa) - i(k^2 - q^2) \sinh(qa)} \quad (51)$$

$$\frac{E}{A} = \frac{2kq e^{-ika}}{2kq \cosh(qa) - i(k^2 - q^2) \sinh(qa)} \quad (52)$$

Z (50) je koeficient odrazivosti (R i T je při pevném V_0 funkcí energie):

$$R(E) = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{(k^2 + q^2)^2 \sinh^2(qa)}{4k^2q^2 \cosh^2(qa) + (k^2 - q^2)^2 \sinh^2(qa)} \quad (53)$$

Koeficient propustnosti bude podle (45) (uvědomme si, že v (45) $k_2 = k_1 = k$, neboť k pro $x < 0$ je rovno k pro $x > a$; v optické analogii v odst. 2.2 to odpovídá šíření dopadající a prošlé vlny (pro $x > a$) v prostředí se stejným indexem lomu)

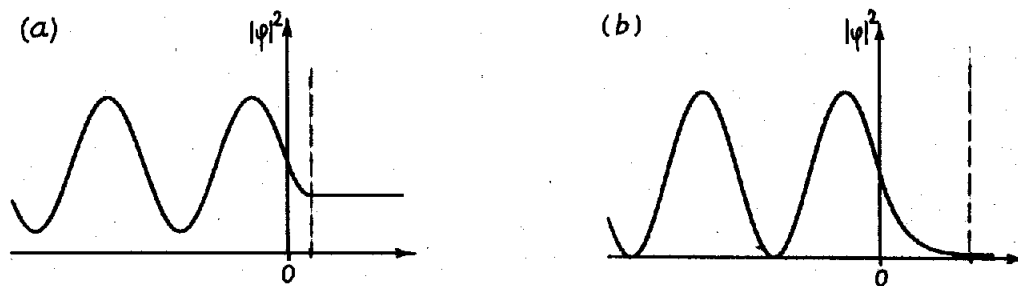
$$\begin{aligned} T(E) &= \left| \frac{E}{A} \right|^2 = \frac{4k^2q^2}{4k^2q^2 \cosh^2(qa) + (k^2 - q^2)^2 \sinh^2(qa)} = \\ &= \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 \left[\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} (V_0 - E)a \right]} \end{aligned} \quad (54)$$

Vidíme, že skutečně platí $R + T = 1$.

Velice častý je případ, kdy $qa \gg 1$, tj. $(V_0 - E) \gg \frac{\hbar^2}{2ma^2}$;

potom $\cosh(qa) \approx \sinh(qa) \approx e^{qa}/2$ a koeficient propustnosti (54) je přibližně

$$T(E) = \frac{16k^2q^2 e^{-2qa}}{(k^2 + q^2)^2} = 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0} \right) \exp \left[-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \right] \quad (55)$$



Obr. 30. Hustota pravděpodobnosti výskytu částice, přicházející k bariéře zleva, s energií $E = V_0/2$; šířka bariéry: (a) $a = 1/2q$, (b) $a = 2/q$.

Uvedme si pro ilustraci několik příkladů tunelového jevu.

(i) Průchod elektronu a protonu stejnou bariérou

Nechť elektron s energií $E = 1\text{eV}$ dopadá na bariéru podle obr.29, přičemž $V_0 = 2\text{eV}$ a šířka bariéry $a = 0,1\text{nm}$. Hodnota $qa = 5,145$, takže je ještě dobře možné použít aproximaci (55). Vypočtete-li si explicitně konstanty C, D v (49b), zjistíte, že z podmínky $qa \gg 1$ vyplývá $|C| \ll |D|$ a vlnová funkce (49b) může být přibližně psána

$$\psi_2(x) \approx D e^{-qx} \quad (0 < x < a) \quad (56)$$

Potom veličina

$$\frac{1}{q} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \quad (57)$$

je vzdálenost, na níž by se v oblasti bariéry (pro $E < V_0$) zmenšila amplituda vlnové funkce e -krát. Protože pro náš elektron a bariéru je

$(q^{-1})_{el} = 0,194\text{ nm}$ ($a = 0,1\text{nm}$), bude amplituda (a tedy i koeficient propustnosti T) za bariérou poměrně velká. Dosazením číselných hodnot do (54) dostaneme

$$T_{el} = 0,777$$

Z hlediska klasické mechaniky elektron nemohl vůbec bariérou projít, zatímco kvantově-mechanické řešení ukazuje, že zhruba v osmi z deseti případů projde.

Jestliže na tutéž bariéru bude dopadat proton s energií 1eV , bude pro něj $(q^{-1})_{prot} = 0,0046\text{ nm}$ a koeficient propustnosti

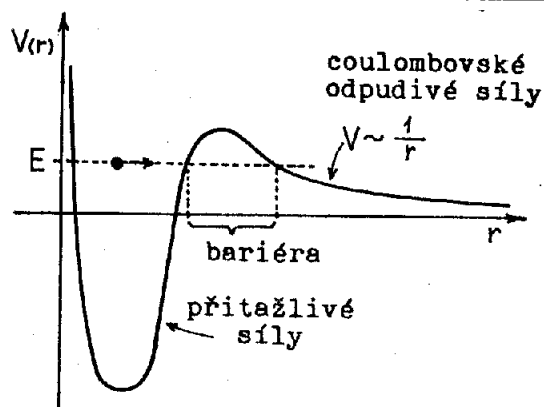
$$T_{prot} \approx 4 \cdot 10^{-19}$$

Pro mnohem těžší proton je tedy pravděpodobnost průchodu bariérou zanedbatelná.

(ii) α -rozpad jádra

Je známo, že některá jádra mohou emitovat α -částice; tato skutečnost může být kvalitativně objasněna pomocí tunelového jevu. Teorie α -rozpadu vychází z představy, že α -částice jsou v jádře drženy ohromnými přitažlivými silami (podobnými těm, které zajišťují vazbu protonů

a neutronů), jejichž dosah je však tak malý, že jejich vliv na α -částici, která je vně jádra, lze zcela zanedbat. Protože α -částice a jádro mají kladný náboj, budou se elektrostaticky odpuzovat, jestliže α -částice bude vně jádra; naopak, v jádře je (ve srovnání se zmíněnými přitažlivými silami) vliv elektrostatického odpuzování zanedbatelný. Schematicky je průběh potenciálu obojích sil znázorněn na obr.31.



Obr. 31.

Schematické znázornění potenciálu, v němž se nachází α -částice v jádře a vně jádra. Potenciál předpokládáme sféricky symetrický, tj. závislý pouze na vzdálenosti r α -částice od jádra. E je energie α -částice v jádře.

Předpokládejme, že α -částice se může uvnitř jádra pohybovat více nebo méně volně ve všech směrech; je známo, že rychlost tohoto pohybu je řádově 10^7 m/s. Protože těžká radioaktivní jádra (jako např. jádro U) mají poloměr řádově 10^{-14} m, znamená to, že α -částice "narazí" na bariéru asi 10^{21} -krát za vteřinu; přitom pokaždé je pravděpodobnost, že bariérou projde, rovna koeficientu propustnosti T (55). Pravděpodobnost, že za 1s vyletí z jádra je tudíž

$$P \approx 10^{21} T \text{ s}^{-1}$$

Střední doba života jádra τ je nepřímo úměrná P , tj. $\tau = 10^{-21} / T$ s. K výpočtu T je nutné znát $(V_0 - E)$ a šířku bariéry a . Reálná bariéra má ovšem tvar značně odlišný od pravouhlé bariéry na obr.29. Výraz (55) proto můžeme použít jen pro řádový odhad T . Pro jádro uranu je $(V_0 - E) \approx 12$ MeV a střední šířka bariéry okolo $3 \cdot 10^{-14}$ m; hmotnost α -částice je $6,4 \cdot 10^{-27}$ kg, takže exponent v (55)

$$\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \approx 90$$

Vzhledem k e^{-90} můžeme v (55) položit koeficient u exponenty roven 1, takže

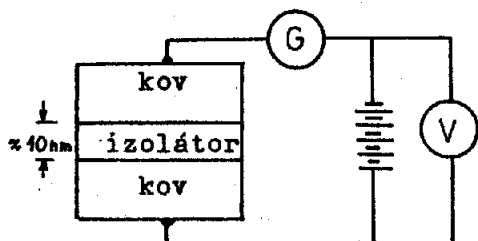
$$\tau = 10^{-21} \cdot e^{90} \approx 10^{18} \text{ s} \approx 3 \cdot 10^{10} \text{ roků.}$$

Vezmeme-li např. 4g uranu, obsahuje tento vzorek asi 10^{22} jader a počet emitovaných α -částic za vteřinu bude řádově 10^4 , což je již dobře registrovatelný počet.

Je jasné, že koeficient propustnosti T silně závisí na přesných hodnotách $(V - E)$, a, neboť vystupují v exponentu; rovněž průběh potenciálu $V(r)$ má na T velký vliv. Není proto překvapující, že experimentálně zjišťované hodnoty τ , leží pro různá jádra ve velmi širokém intervalu [6].

(iii) Dva kovy oddělené izolátorem

Pouze informativně se zmíníme o tunelovém jevu v oblasti fyziky pevných látek. Jestliže oddělíme dva kovy tenkou dielektrickou vrstvou (s tloušťkou řádově 10nm) a přiložíme na kovové elektrody napětí (obr. 32), můžeme registrovat proud procházející obvodem. Izolátor funguje



Obr. 32.

Průchod vodivostních elektronů od jedné kovové elektrody k druhé, tunelováním přes potenciálovou bariéru, vytvořenou vrstvičkou izolátoru.

jako potenciálová bariéra a to co zaznamená galvanoměr G zařazený do okruhu, je skutečně proud elektronů, které tunelovaly přes izolátor. Ze závislosti procházejícího proudu na přiloženém napětí je možné se mnoho dozvědět o stavech elektronů v kovech.

Zbývá nám nyní všimnout si případu, kdy

(b) celková energie částice dopadající na bariéru je $E > V_0$ (obr.29b)

V řešení Schrödingerovy rovnice (48) se změní jen vlnová funkce $\psi_2(x)$ (49b) na

$$\psi_2(x) = C e^{i\kappa x} + D e^{-i\kappa x} \quad (0 < x < a) \quad (58a)$$

kde

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} = i q \quad (58b)$$

Okrajové podmínky zůstanou nezměněné, tak jak byly uvedeny za funkcemi (49). Máme-li však již provedeno řešení rovnic (50) pro $E < V_0$, je zbytečné ho provádět znovu; využijeme-li relaci (58b) a porovnáme funkce (58a), (49b), vidíme, že stačí ve výsledcích zaměnit q za $(-i\kappa)$.

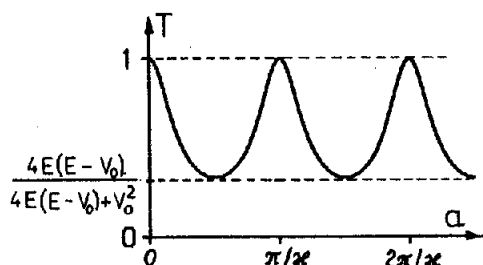
Pro koefficient odrazu tak z (53) dostaneme (viz dod.A)

$$R(E) = \frac{(k^2 - \kappa^2)^2 \sin^2(\kappa a)}{4k^2 \kappa^2 + (k^2 - \kappa^2)^2 \sin^2(\kappa a)} \quad (59)$$

a pro koefficient propustnosti z (54)

$$\begin{aligned} T(E) &= \frac{4 k^2 \kappa^2}{4k^2 \kappa^2 + (k^2 - \kappa^2)^2 \sin^2(\kappa a)} = \\ &= \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}(E - V_0)a\right)} \quad (60) \end{aligned}$$

Závislost T na šířce bariéry a (pro dané E) je na obr.33; maximální hodnoty $T = 1$ nabývá v bodech $a = n\pi/\kappa$ ($n=0,1,2,\dots$). Analogická situace nastává v optice u Fabryho-Perotova interferometru; rezonance (když $T = 1$) se objevují tehdy, když $a = n\lambda/2$ (λ je vlnová délka v oblasti $0 < x < a$; zde $\kappa = 2\pi/\lambda$). Sledujeme-li šíření vlnového klubka

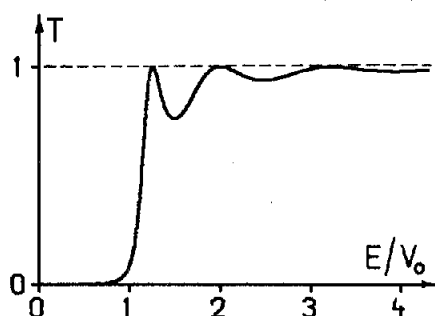


Obr. 33.

Závislost koeficientu propustnosti T na šířce bariéry a , při $E = 1,1 V_0$.

(způsobem o němž bude zmínka v odst. 2.6) přes bariéru, ukáže se, že při splnění rezonanční podmínky, zůstává klubko poměrně dlouho v oblasti $0 < x < a$; v kvantové mechanice se tento jev nazývá rezonanční rozptyl.

Závěrem si ještě uvedme závislost koeficientu propustnosti T na poměru E/V_0 (pro pevné $V_0 a^2$) (obr.34).



Obr.34.

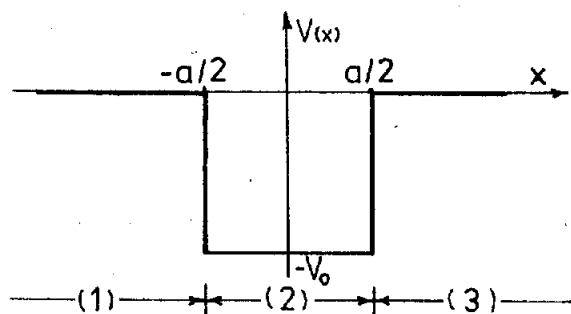
Závislost koeficientu propustnosti T na E/V_0 pro $V_0 a^2 = 40 \hbar^2/2m$ a $0 \leq E \leq 4V_0$.

2.5) Potenciálová jáma. Vázané a volné stavy. Parita

V úlohách, které jsme dosud řešili, mohla celková energie částice E mít libovolnou hodnotu. Můžeme na ně pohlížet jako na model rozptylu částice v nějakém potenciálovém poli; částici, která do oblasti proměnného potenciálu přichází, můžeme udělit libovolnou energii. Potenciál, který jsme zatím uvažovali, přitom odpovídal odpudivým silám (že tomu tak je, rozvažte např. na potenciální energii elektrostatického působení mezi dvěma náboji).

Nyní si všimneme ještě úlohy, která bude modelovat přitažlivé silové působení. Uvidíme, že v tomto případě se pro $E < 0$ může objevit nový typ řešení - diskretní (jen pro určitá E) vázané stavy v oblasti změněného potenciálu.

Průběh potenciální energie $V(x)$, který nyní budeme studovat, je na obr. 35.



Obr. 35.

Pravouhlá potenciálová jáma
hloubky V_0 ($V_0 > 0$) a šířky a .

Rozlišit musíme opět 2 případy.

(a) Celková energie částice $-V_0 < E < 0$

Klasická částice by mohla mít libovolnou hodnotu $E \in [-V_0, 0]$. Lokalizovaná by byla přesně v oblasti $x \in (-a/2, a/2)$; pohybovala by se zde volně, pouze na "stěnách" v $x = \pm a/2$ by se pružně odrážela.

Kvantově-mechanické řešení vychází opět ze stacionární Schrödingrovovy rovnice (20). Pro oblasti (1)-(3) (podle obr.35) bude mít tvar:

$$V(1) \text{ a } (3): \quad \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} - \rho^2 \psi(x) = 0 \quad (|x| > a/2) \quad (61a)$$

$$V(2): \quad \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + k^2 \psi(x) = 0 \quad (|x| < a/2) \quad (61b)$$

kde pro $-V_0 < E < 0$ (tj. $E < 0$, $V_0 > 0$)

$$\rho = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}, \quad k = \frac{\sqrt{2m(V_0 + E)}}{\hbar} \quad (62)$$

Obecná řešení v jednotlivých oblastech jsou:

$$(1): \quad \psi_1(x) = A e^{\rho x} + B e^{-\rho x} \quad (x < -a/2) \quad (63a)$$

$$(2): \quad \psi_2(x) = C e^{ikx} + D e^{-ikx} \quad (|x| < a/2) \quad (63b)$$

$$(3): \quad \psi_3(x) = E e^{\rho x} + F e^{-\rho x} \quad (x > a/2) \quad (63c)$$

Konstanty A, \dots, F určíme opět z hraničních podmínek pro $x \rightarrow \pm \infty$ a pro $x = \pm a/2$. Předně: v oblasti (1) je nepřijatelné řešení $\sim e^{-\rho x}$, neboť pro $x \rightarrow -\infty$ diverguje; musí proto být

$$B = 0;$$

ze stejného důvodu je pro $x > a/2$ nepřijatelné řešení $\sim e^{\rho x}$, takže musíme položit

$$E = 0.$$

Pro zbývající 4 konstanty - A, C, D, F - nám okrajové podmínky v $x = \pm a/2$:

$$\psi_1(-a/2) = \psi_2(-a/2), \quad \left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_{x=-a/2} = \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=-a/2} \quad (64a)$$

$$\varphi_2(a/2) = \varphi_3(a/2) \quad , \quad \left. \frac{d\varphi_2}{dx} \right|_{x=a/2} = \left. \frac{d\varphi_3}{dx} \right|_{x=a/2} \quad (64b)$$

dají 4 homogenní rovnice. Ty budou mít netriviální řešení (triviálním řešením se rozumí $A=C=D=F=0$, které nás nezajímá) pouze pro některé hodnoty energie E (pro ty, pro něž bude determinant soustavy roven nule). Jestliže se však (místo bezhlavého vypsání a řešení rovnic (64)) nad problémem trochu zamyslíme, dojdeme k závěru, že místo čtyř rovnic (64), nám stačí řešit pouze soustavu 2 rovnic. Ukážeme si nyní, jak se s výhodou dá při řešení využít symetrie $V(x)$.

Parita

Ne nadarmo jsme volili polohu jámy v intervalu $x \in (-a/2, a/2)$. Protože na celé ose x (od $-\infty$ do $+\infty$) se již žádná jiná změna potenciální energie nepředpokládá, je poloha jámy z fyzikálního hlediska lhostejná. Z matematického hlediska je však přijatá volba výhodná, neboť potenciální energie $V(x)$ je nyní symetrická vzhledem k $x = 0$, tj. platí

$$V(x) = V(-x) \quad (65)$$

I když následující výsledek (67) je možné získat striktně matematicky, omezíme se na jeho získání z hlediska fyzikální interpretace funkce $\varphi(x)$. Platí-li (65), potom není žádný důvod k tomu, aby pravděpodobnost výskytu částice v nějakém bodě x byla jiná než v bodě $(-x)$ (víme již, že pravděpodobnost výskytu je určována právě potenciálem V); musí tedy platit

$$|\varphi(x)|^2 = |\varphi(-x)|^2 \quad (66)$$

a odtud pro samotnou vlnovou funkci

$$\varphi(x) = \pm \varphi(-x) \quad (67)$$

Hledaná funkce $\varphi(x)$ musí být tedy sudá ($s +$) nebo lichá ($s -$). Budeme říkat, že parita vlnové funkce je $+1$ (pro $+$) nebo -1 (pro $-$).

Všimněme si nyní z tohoto hlediska funkcí (63) (s tím, že $B=E=0$):
(i) Výsledná vlnová funkce $\varphi(x)$ (po "sešití" v $x=\pm a/2$) má paritu $+1$:

Aby tomu tak bylo, musí platit:

$$\begin{aligned} \varphi_1(-x) &= \varphi_3(x) && \text{pro } |x| > a/2 \\ \varphi_2(-x) &= \varphi_2(x) && \text{pro } |x| < a/2 \end{aligned} \quad (68)$$

Po dosazení z (63)

$$\begin{aligned} A e^{-\varphi x} &= F e^{-\varphi x} && \text{pro } |x| > a/2 \\ C e^{-ikx} + D e^{ikx} &= C e^{ikx} + D e^{-ikx} && \text{pro } |x| < a/2 \end{aligned}$$

Odtud plyne, že

$$A = F \quad a \quad C = D \quad (70)$$

(ii) Výsledná vlnová funkce $\psi(x)$ má paritu -1 :

V rovnicích (68) vynásobíme jednu stranu (-1) a obdoba rovnic (69) pak je

$$\begin{aligned} A e^{-\rho x} &= -F e^{-\rho x} & (|x| > a/2) \\ C e^{-ikx} + D e^{ikx} &= -C e^{ikx} - D e^{-ikx} & (|x| < a/2) \end{aligned} \quad (71)$$

Odtud

$$A = -F \quad a \quad C = -D \quad (72)$$

Z (63) nyní dostaneme řešení:

(i) s paritou +1

$$\psi_1^{(+)}(x) = A_+ e^{\rho x}$$

$$\psi_2^{(+)}(x) = C_+ \cos(kx)$$

$$\psi_3^{(+)}(x) = A_+ e^{-\rho x}$$

(ii) s paritou -1

$$\psi_1^{(-)}(x) = A_- e^{\rho x}$$

$$\psi_2^{(-)}(x) = C_- \sin(kx) \quad (73)$$

$$\psi_3^{(-)}(x) = -A_- e^{-\rho x}$$

kde $A_+ = A_- = A$, $C_+ = 2C$, $C_- = 2iC$.

V obou případech nám zůstávají k určení pouze dvě konstanty:

A_+, C_+ nebo A_-, C_- . Pro jejich výpočet nám stačí buď (64a) nebo (64b); zbývající dvojice rovnic je ekvivalentní použité dvojici.

Z (64a) dostaneme

(i) pro funkce s paritou +1 rovnice

$$A_+ e^{-\rho a/2} - C_+ \cos(ka/2) = 0 \quad (74)$$

$$A_+ \rho e^{-\rho a/2} - C_+ k \sin(ka/2) = 0$$

Aby rovnice měly netriviální řešení, musí být determinant soustavy roven nule :

$$\begin{vmatrix} e^{-\rho a/2} & -\cos(ka/2) \\ \rho e^{-\rho a/2} & -k \sin(ka/2) \end{vmatrix} = 0 \quad (75)$$

Po rozvedení a krácení $\exp(-\rho a/2)$, dostaneme rovnici

$$k \operatorname{tg} \frac{ka}{2} = \rho \quad (76)$$

Jak k , tak i ρ , závisí na E , takže (76) představuje transcendentní rovnici pro určení možných hodnot celkové energie částice v jámě, ve stavech s paritou +1.

Naprosto stejným způsobem dostaneme

(ii) pro funkce s paritou -1

rovnici k určení možných hodnot energie E

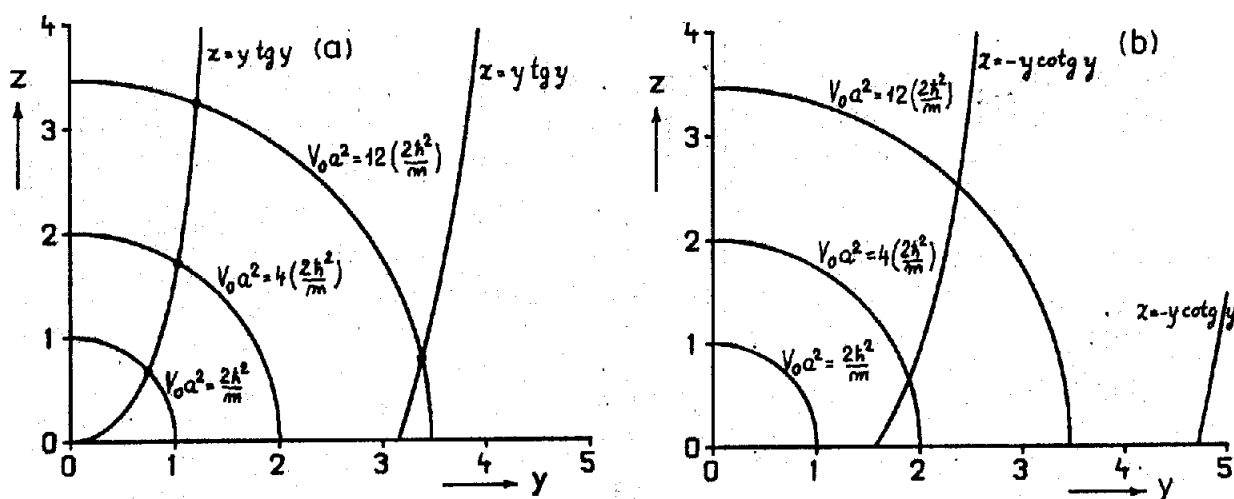
$$k \cotg \frac{ka}{2} = -\rho \quad (77)$$

Došli jsme tedy k závěru, že částice vázaná v oblasti potenciálové jámy může být jen v určitých stacionárních vázaných stavech, jimž přísluší celkové energie, které jsou řešením (76) nebo (77); pro jiné hodnoty celkové energie $E < 0$, nelze najít takové řešení Schrödingerovy rovnice, které by v celém intervalu $x \in (-\infty, +\infty)$ splňovalo podmínky uvedené v odst. II.3,4.

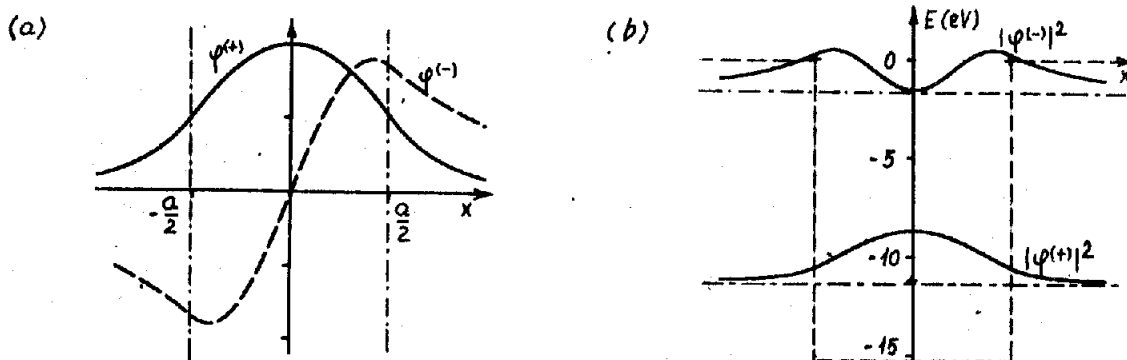
Řešení rovnic (76), (77) je možné provést numericky na počítači nebo, názorněji, graficky např. takto: položíme $y = ka/2$ a $z = \rho a/2$. Potom rovnice (76) má tvar $y \cdot \operatorname{tg} y = z$, přičemž

$$y^2 + z^2 = \frac{ma^2 V_0}{2\hbar^2}.$$

Protože veličiny y, z mohou nabývat pouze kladných hodnot, budou hodnoty energie určeny průsečíky křivky $z = y \cdot \operatorname{tg} y$ s částí kružnice s poloměrem $(ma^2 V_0 / 2\hbar^2)^{1/2}$, která leží v 1. kvadrantu. Obdobně řešení (77) bude dáno průsečíky křivky $z = -y \cot y$ s touž částí kružnice. Příklady těchto grafických řešení jsou v obr. 36. Vlnové funkce a hustoty pravděpodobnosti výskytu částice pro dva možné stavy v jámě s $V_0 a^2 = 8\hbar^2/2m$ jsou v obr. 37.



Obr. 36. Grafické řešení rovnice : (a) (76), (b) (77). Kružnice jsou pro $V_0 a^2 = 2 \hbar^2/m$, $4(2 \hbar^2/m)$ a $12(2 \hbar^2/m)$. Pro nejnižší hodnotu $V_0 a^2$ existuje jediný stav s paritou +1, pro $V_0 a^2 = 8 \hbar^2/m$ jeden stav s paritou +1 a jeden s paritou -1 a konečně pro $V_0 a^2 = 24 \hbar^2/m$ existují již dva stavy s paritou +1 a jeden s paritou -1. Je zřejmé, že při zadané hmotnosti částice m , závisí počet možných vázaných stavů v jámě na parametrech jámy prostřednictvím součinu $V_0 a^2$.



Obr. 37. Dva možné stavy v jámě pro niž $V_0 a^2 = 8 \hbar^2/m$ (srov. obr. 36):

(a) vlnové funkce ψ_1 pro stav s energií E_1 (paritou +1) a ψ_2 pro stav s energií E_2 (parita -1). Pro elektron v jámě šířky 0,2 nm je $V_0 = 15,24$ eV, $E_1 = -11,2$ eV a $E_2 = -1,56$ eV. (b) hustoty pravděpodobnosti výskytu částice ve stavech ψ_1 , ψ_2 . Osa x pro kreslení $|\psi|^2$ je posunuta do $V = -E_1$, resp. $V = -E_2$. V (a) i (b) je měřítko pro ψ , resp. $|\psi|^2$, libovolné, poměry amplitud obou funkcí jsou však správné (za předpokladu, že ψ_1, ψ_2 jsou normalizované).

Jednoduché řešení získáme v nekonečně hluboké jámě, tj. pro $V_0 \rightarrow \infty$. Je to sice případ fyzikálně nereálný, ale často může (především pro nejnižší stavy v hluboké jámě) posloužit jako dobrá aproximace. Aby bylo možné zřetelně provést limitní přechod, je vhodnější úlohu přeformulovat (posunout hladinu již připisujeme nulovou energii) tak, že

$$V(x) = 0 \quad \text{pro } |x| < a/2 \quad \text{a } V(x) \rightarrow \infty \quad \text{pro } |x| > a/2 \quad (78)$$

Vlnová funkce $\psi(x)$ pak musí být rovna nule vně jámy (srov. odst. 2.3), tj

$$\psi(x) = 0 \quad \text{pro } |x| \geq a/2 \quad (79a)$$

Uvnitř jámy bude řešením opět (63b) s tím, že nyní

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{a} \quad E > 0 \quad (80)$$

Úvahy o paritě řešení zůstávají v platnosti, takže dostáváme dvě posloupnosti funkcí:

$$\text{s paritou +1 : } \psi(x) = A \cos(kx) \quad (81a)$$

$$\text{s paritou -1 : } \psi(x) = B \sin(kx) \quad (81b)$$

přičemž musí pro obě platit okrajové podmínky

$$\psi(-a/2) = 0, \quad \psi(a/2) = 0 \quad (82)$$

Ty je možné splnit pro sudá řešení (81a) jen pro určité hodnoty k a to

$$k_n = \frac{\pi}{a} n \quad \text{pro } n = 1, 3, 5, \dots \quad (83a)$$

a pro lichá řešení (81b) jsou to naopak hodnoty

$$k_n = \frac{\pi}{a} n \quad \text{pro } n = 2, 4, 6, \dots \quad (83b)$$

Dostáváme tak posloupnost normalizovaných vlnových funkcí

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos(n \frac{\pi}{a} x) & \text{pro } n = 1, 3, 5, \dots \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(n \frac{\pi}{a} x) & \text{pro } n = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (79b)$$

přičemž částice ve stavu s kvantovým číslem n (vlnovou funkcí $\varphi_n(x)$) má energii, kterou dostaneme z (80) a (83),

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m a^2} \cdot n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (79c)$$

Všimněme si, že nejnižší možná energie E_1 je v souladu s relací neurčitosti; protože neurčitost stanovení souřadnice je řádově a , bude neurčitost v impulsu řádu (\hbar/a) a minimální kinetická (a zde i celková) energie tedy je řádově \hbar^2/ma^2 .

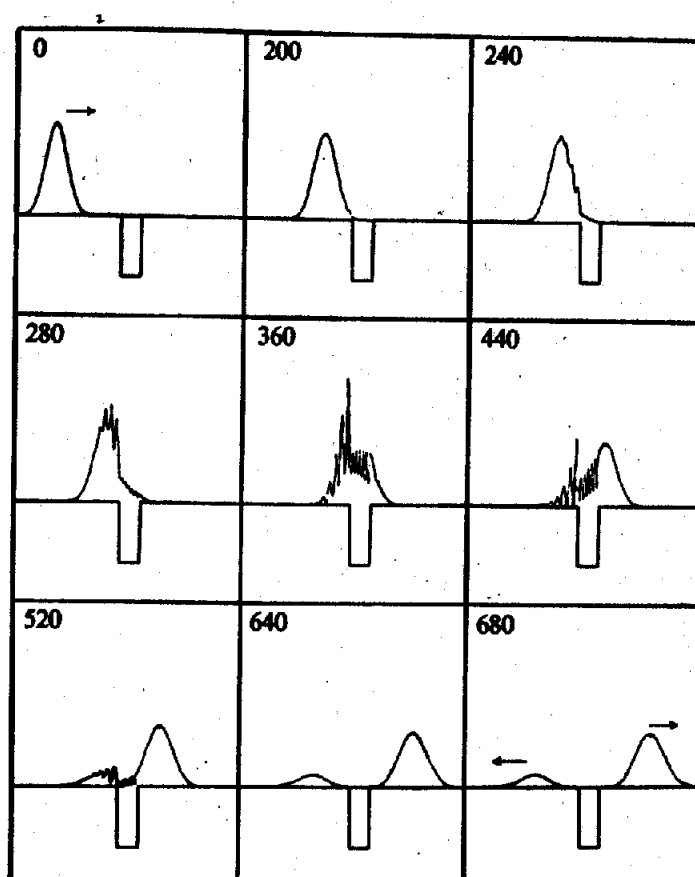
Když jsme takto dořešili případ $E \in (-V_0, 0)$, měli bychom přejít k alternativě $E > 0$. Tuto úlohu však již máme vyřešenu v odst. 2.4b (situace $E > V_0$). Stačí jen ve výrazu (58b) pro α zaměnit V_0 za $(-V_0)$; všechny ostatní úvahy o koeficientech R a T již zůstanou v platnosti. Částice, která má celkovou energii E větší než je hloubka jámy ($E - V_0 > 0$), již může mít libovolnou energii E . Při průchodu oblastí jámy (přitažlivého potenciálu) se bude rozptylovat (určeno R a T), nedojde však k trvalé lokalizaci (zachycení) v oblasti potenciálové jámy, tj. pro $E > 0$ neexistují vázané stavy.

2.6) Vlnové klubko v oblasti změny potenciálu

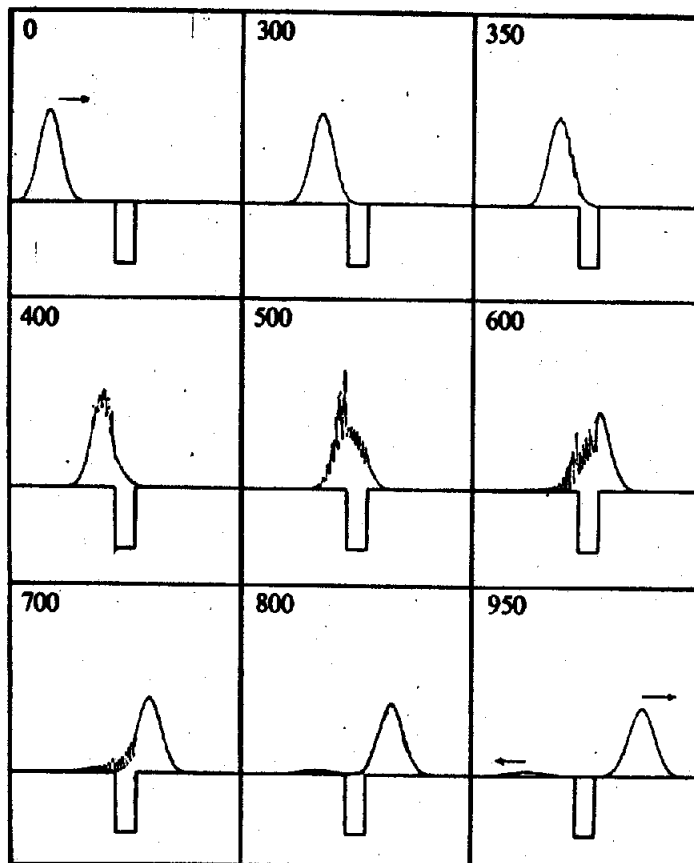
Již jsme se zmínili, že řešení, nalezená v předcházejících odstavcích (vyjma vázaných stavů v jámě), neodpovídají příliš dobře fyzikální realitě. Stacionární řešení, která jsme nacházeli (dopadající, odražené a prošlé vlny) byly periodické funkce "protažené do $+\infty$ nebo $-\infty$ ". Tyto funkce nemohly představovat fyzikálně reálný stav už proto, že nejsou kvadraticky integrovatelné (viz odst. II.3.2 a II.3.4). Lineární superpozicí z nich však můžeme vytvořit vlnové klubko (odst. II.5), které již tyto nedostatky nemá. Navíc, protože vlnové klubko je vytvořeno superpozicí zmíněných stacionárních stavů, je poměrně snadné zjistit jeho časový vývoj: stačí vynásobit každý z koeficientů v rozvoji členem $\exp(-iEt/\hbar)$ (srov. odst. 1.3). Jednoduché je ovšem jen sledování evoluce klubka v oblasti konstantního potenciálu (odst. II.5.3). Chceme-li ho sledovat při průchodu oblastmi v nichž se potenciál mění, je jeho vývoj

dán řešením časové Schrödingerovy rovnice (10). Nalezení řešení v analytickém tvaru, pro libovolný časový okamžik, není možné ani v těch případech, kterými jsme se právě zabývali. Zůstává pak jen možnost numerického řešení Schrödingerovy rovnice na počítači. Nebudeme se touto problematikou zabývat, pouze uvedeme již mnohokrát přetiskované výsledky takových výpočtů z práce: Goldberg A. et al.: Computer-Generated Motion Pictures of One-Dimensional Quantum Mechanical Transmission and Reflection Phenomena, Am.J.Phys. 35(1967)177.

Výchozím stavem je zde gaussovské vlnové klubko (odst.II.5) - $\psi(x;0)$ - postupující vpravo, směrem k potenciálové bariéře nebo jámě; dílčí obrázky jsou "expozicemi" klubka v různých časových intervalech (čas je uveden vpravo nahoře). Střední hodnota energie (klubko je superpozicí stacionárních stavů s různou energií) částice reprezentované vlnovým klubkem, je uvedena u obrázků. Prudké oscilace v některých obrázcích jsou výsledkem interference dopadající a odražené vlny.



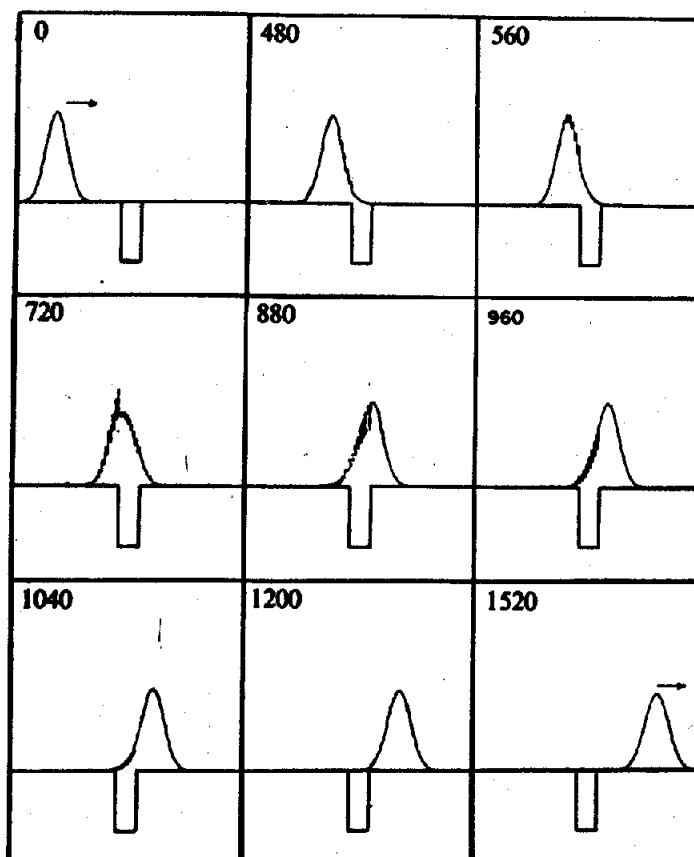
Obr. 38. Rozptyl gaussovského klubka na pravouhlé potenciálové jámě hloubky V_0 ($V_0 > 0$). Střední hodnota energie částice je $E = V_0/2$.



Obr. 39.

Totéž jako v obr. 38 , jen
střední hodnota energie

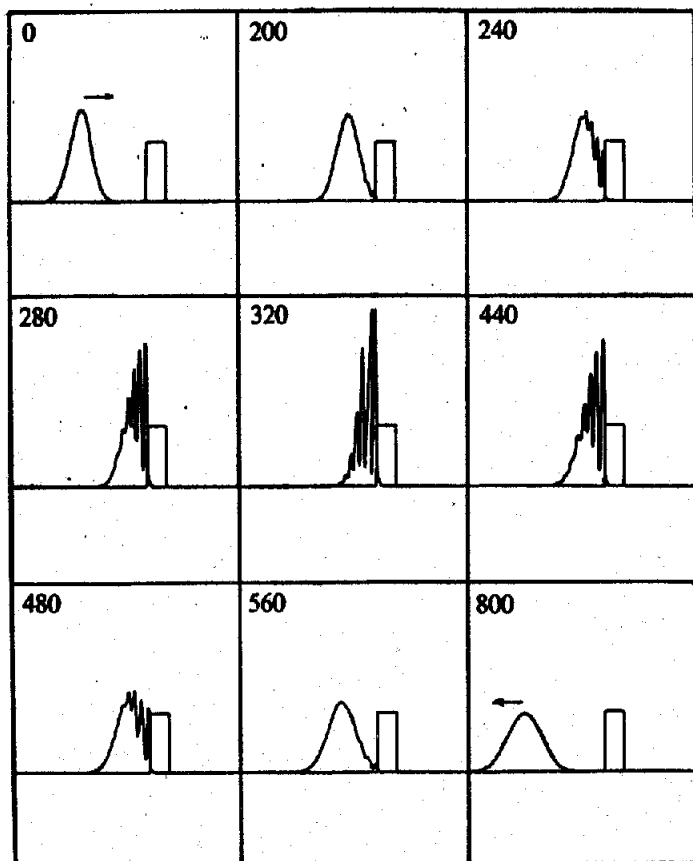
$$E = V_0$$



Obr. 40.

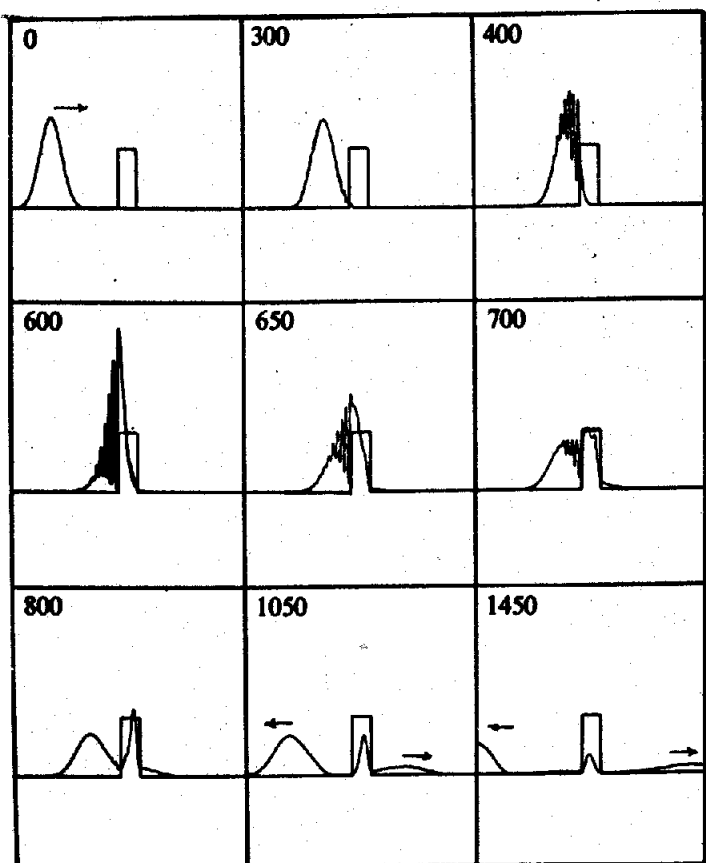
Totéž jako v obr. 38 , jen
střední hodnota energie

$$E = 2V_0$$



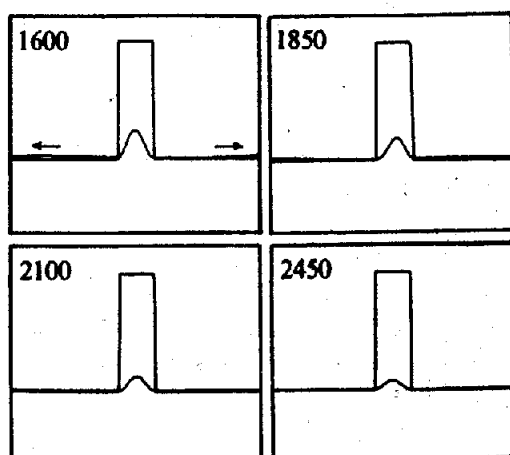
Obr. 41.

Rozptyl gaussovského klubka
na pravouhlé bariéře výšky V_0 .
Střední hodnota energie částice je $E = V_0/2$.

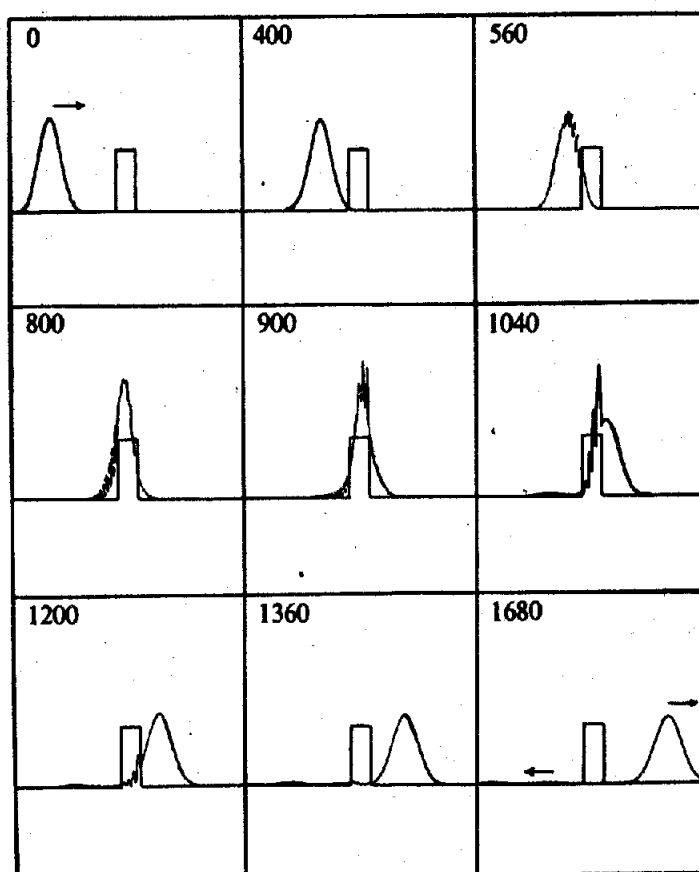


Obr. 42(a).

Totéž co v obr. 41, jen
střední hodnota energie
 $E = V_0$.
Všimněte si rezonančního
jevu: část hustoty pravděpodob-
nosti je dlouho lokalizována
v oblasti bariéry.



Obr. 42(b). Detail poklesu rezonančního stavu z obr. 42(a).



Obr. 43. Totéž co v obr.41 , jen střední hodnota energie částice je $E = 2 V_0$.