

**KVANTOVÁ**

**MECHANIKA**

**I**

**Matematicko-fyzikálna fakulta  
Univerzity Komenského Bratislava**



## **KVANTOVÁ MECHANIKA I**

**Radoslav Böhm**

<http://www.ddp.fmph.uniba.sk/bohm>

**Martin Klimo**

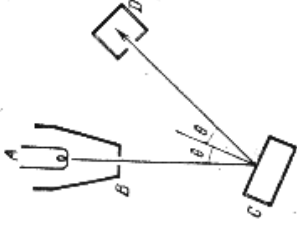
<http://www.ddp.fmph.uniba.sk/klimo>

verzia z 11.septembra 2000

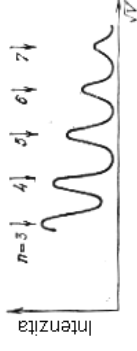
# Obsah

|                                                                        |     |
|------------------------------------------------------------------------|-----|
| Úvod                                                                   | iii |
| 1 Popis častíc v kvantovej mechanike.                                  | 1   |
| 1.1 Vlnová funkcia                                                     | 1   |
| 1.2 Heisenbergov princíp neurčitosti                                   | 2   |
| 1.3 Optika a kvantová mechanika.                                       | 9   |
| 1.4 Bezčasová Schr a jej riešenia                                      | 12  |
| 2 Jednoduché sústavy                                                   | 15  |
| 2.1 Potenciálne steny                                                  | 16  |
| 2.1.1 Prípád $U < E$ :                                                 | 16  |
| 2.1.2 Prípád $E < V$ :                                                 | 19  |
| 2.2 Potenciálové valy                                                  | 23  |
| 2.2.1 Nadbariérový prechod $E > U$                                     | 23  |
| 2.2.2 Podbariérový prechod $U > E$                                     | 26  |
| 2.2.3 Aplikácie podbariérového prechodu                                | 29  |
| 2.3 Potenciálové jamy                                                  | 34  |
| 2.3.1 Nekonečná jama                                                   | 34  |
| 2.3.2 Jednorozmerná polonekonečná jama.                                | 36  |
| 2.3.3 Častica v potenciálnej jame konečnej hĺbky.                      | 38  |
| 2.3.4 Nesymetrické konečné jamy-kvalitatívne.                          | 41  |
| 2.3.5 Dve pravouhlé potenciálne jamy                                   | 42  |
| 3 Približná metóda riešenia Schr                                       | 47  |
| 3.1 Bohr-Sommerfeldova podmienka.                                      | 47  |
| 3.1.1 Aplikácie B-S podmienky                                          | 50  |
| 3.1.2 Harmonický oscilátor                                             | 50  |
| 3.1.3 Častica viazaná v krabici                                        | 54  |
| 3.1.4 Atóm vodíka                                                      | 54  |
| 4 Vlnový balík-prostriedok na zobrazenie trajektórie klasických častíc | 57  |
| 4.1 Vlnná častica                                                      | 57  |
| 4.2 Pohyb častice v nekonečne hlbokoj pravouhlej potenciálovej jame.   | 60  |
| 4.3 Lineárny harmonický oscilátor.                                     | 61  |
| 5 Dodatok                                                              | 63  |
| 5.1 Lineárny harmonický oscilátor - LHO.                               | 63  |
| 5.1.1 a, LHO cez SCHR                                                  | 63  |
| 5.2 Podbariérový prechod.                                              | 66  |

vlna-častica nie je výsadou optických javov, ale základnou vlastnosťou všetkých objektov mikrosvetu. V roku 1924 de Broglie otočil Planckovu hypotézu a priradil časticiam s hybnosťou  $\vec{p}$  vlny s vlnovou dĺžkou  $\lambda = \frac{h}{p}$ . Vlnové vlastnosti boli naozaj o dva roky neskôr aj experimentálne potvrdené Davisonom a Germerom. Merali smerovú závislosť intenzity rozptýleného zväzku elektrónov dopadajúcich na kryštál Ni



Zafixovaním uhla  $\theta$  pozorovali typický interferenčný obraz pozostávajúci z intererénnych maxím a miním. Ich poloha závisela od energie dopadajúceho zväzku.



Podrobnou analýzou výsledkov sa priamo overila správnosť de Broglieho vzťahu. Elektróny sa s najväčšou pravdepodobnosťou vyskytovali v oblastiach s maximálnou intenzitou de Broglieho vln. Neskôr sa získali difrakčné obrazy neutrónov, protónov, atómových a molekulových zväzkov. Difrakčné vlastnosti častíc sa v súčasnosti bežne používajú pri analýze kryštálov (podobne ako röntgenová analýza).

Experimentálne skúsenosti XIX storočia sú neuprosné a nútia fyzikov vypracovať novú teóriu, ktorá by prirodzeným spôsobom zohľadnila časticové aj vlnové vlastnosti objektov mikrosvetu, protirečiace predstavám a zákonom klasickej fyziky. V roku 1926 a 1927 Schrödinger, Heisenberg a Born vypracujú základy takejto teórie s názvom kvantová mechanika. Kvantová mechanika popisuje správanie hmoty a javy na úrovni mikrosvetu, ktoré sú neprístupné nášmu zmyslovému vnímaniu. S týmito javmi nemáme žiadne skúsenosti z každodenného života a preto mnohé z nich sa nám môžu zdať veľmi podivné až neskutočné. Dokonca ani odborníci na kvantovú mechaniku jej nerozumejú do takej miery, do akej by si to želali. Spomeňme aspoň dva citáty : " *Anyone who is not shocked by*

## Úvod

Klasická fyzika na začiatku XX storočia rozdeľovala objekty, ktoré skúmala, na dva principiálne odlišné typy: častice a vlny. Pod časticami sa predovšetkým rozumeli telesá makrosvetu, ktoré sa správali podľa Newtonových zákonov mechaniky, dali sa v jednotlivých časových okamihoch lokalizovať a pohybovali sa po konkrétnych trajektóriách. Naproti tomu vlny boli „rozmazané“ v priestore, nedala sa im priradiť trajektória a ich charakteristickou vlastnosťou bola interferencia.

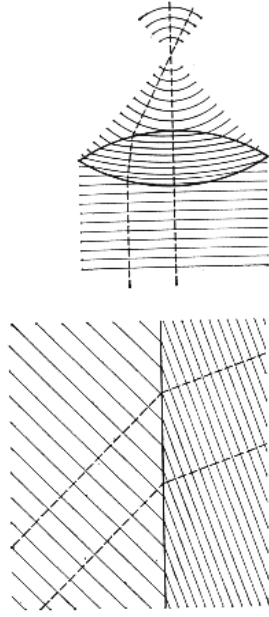
Koncom minulého storočia sa rozvojom experimentálnej fyziky začínajú hromadiť údaje, narušujúce predstavu o ostrej hranici medzi časticami a vlnami (najmä v oblasti mikrosvetu). Prvým poznatkom, ktorý naznačil, že v mikrosvete sa dejú z hľadiska klasickej fyziky pozoruhodné veci, bol neúspech pri hľadaní vysvetlenia experimentálnych údajov o spektre žiarenia čierneho telesa. Vysvetlenie našiel v roku 1900 nemecký fyzik Max Planck, ktorý musel urobiť predpoklad cudzej klasickej fyziky, že atómy látky pri interakcii so svetelnými vlnami s frekvenciou  $\omega$  emitujú žiarenie nespojite, po malých kvantách energie  $h\omega$ . Stále však zostáva názor, že svetelná energia sa šíri priestorom spojitě ako elektromagnetická vlna. V roku 1905 Einstein pomocou Planckovej hypotézy úspešne vysvetľuje zákonitosti fotoelektrického javu. Zájde však ďalej a predpokladá, že svetlo sa nielen vyžaruje, ale aj šíri po kvantách, ktoré si možno predstaviť ako guľôčky s koncentrovanou energiou. Tento názor je v príkrom rozpore s vlnovou teóriou svetla, podľa ktorej je energia spojitě „roztečená“ v priestore. Definitívne potvrdenie korpuskulárneho charakteru elektromagnetických vln priniesli v roku 1923 experimenty amerického fyzika Comptona.

Planckove a Einsteinove hypotézy, úspešné pri interpretácii experimentálnych javov, sú v príkrom rozpore s predstavami klasickej fyziky o vlnovej povahe svetla. Na druhej strane existuje bohatý a rôznorodý experimentálny materiál potvrdzujúci správnosť vlnovej teórie, ktorá bola overená množstvom optických javov (interferencia a difrakcia svetla). Svetlo prestáva byť bežným objektom klasickej fyziky (vlna, častica) a stáva sa objektom mikrosvetu s vlnovými aj časticovými vlastnosťami.

Optika od svojho vzniku nebrala do úvahy korpuskulárne vlastnosti svetla a zrazu boli dokázané. De Broglie v roku 1923 upozorňuje, že v časticovej teórii sa môžeme dopustiť opakej chyby, vyzdvihovaním časticovej povahy materiálnych objektov a neprípustnosťou ich vlnových prejavov. Podľa jeho názoru dualizmus

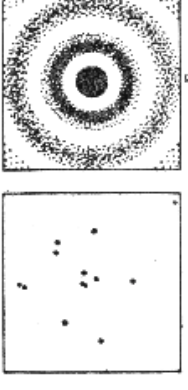
*quantum theory has not understood it*", Niels Bohr, "I think I can safely say that nobody understands quantum mechanics", Richard P. Feynman). Kvantová mechanika má mnoho spoločných prvkov s optikou, ktorá nám pomôže vypestovať intuíciu a uľahčí predvídať nepredvídateľné.

Predstava objektu s vlastnosťami vln aj častíc je na prvý pohľad nezvládnuiteľná. V geometrickej optike nám to však nerobilo žiadne problémy. Spomeňme si na klasické zobrazovacie úlohy:



Ide o lom rovinnej vlny pri prechode optickým rozhraním a šošovkou. Plné čiary zobrazujú vlnoplochy, prerušované lúče. Svetelné lúče sú kolmé na vlnoplochy a reprezentujú trajektóriu častíc svetla-fotónov. Takýmto spôsobom sú v geometrickej optike vzájomne viazané vlny (vlnoplochy) s časticami (lúče).

prejavia iba vtedy, keď v danom okamihu dopadá na štrbiny veľké množstvo častíc a interferenčný obraz je výsledkom ich vzájomnej interakcie. Experimentami s veľmi slabým zdrojom svetla bola však táto možnosť vylúčená. Interferenčný obraz sa formuje dokonca aj vtedy, ak intenzita svetla je taká malá, že v každom okamihu je v štrbinách nanajvýš jeden fotón. Pri malom počte fotónov sú na tienitku náhodne rozmiestnené čierne škvrnky a až po dopade väčšieho počtu sa vytvárajú charakteristické maximá a minimá



## 1.1 Vlnová funkcia

Medzi fotónmi a ostatnými časticami mikrosвета neexistuje žiadny principiálny rozdiel. Všetky častice majú okrem korpuskulárnych vlastností charakterizovaných hybnosťou  $\vec{p}$  a energiou  $E$  aj vlastnosti vlnové, reprezentované vlnovou dĺžkou  $\lambda$  a uhlovou frekvenciou  $\omega$ . Nájďme transformačný vzťah medzi oboma charakteristikami  $(\vec{p}, E) \leftrightarrow (\lambda, \omega)$ . Pomôžeme si výrazmi platnými pre fotóny, ktoré zovšeobecňujú pre všetky ostatné materiálne častice. Vlnovú dĺžku svetla  $\lambda$  môžeme vyjadriť cez energiu fotónu  $\lambda = \frac{hc}{E}$  resp. jeho hybnosť  $\lambda = \frac{h}{p}$ . Prvý vzťah sa nedá zovšeobecniť na materiálne častice prinajmenšom z dvoch dôvodov: 1, obsahuje rýchlosť svetla  $c$ , čo je veličina špecifická pre elektromagnetické žiarenie; 2, obsahuje energiu  $E$ , ktorá je určená až na aditívnu konštantu, súvisiacu s voľbou vzťažného bodu. Za takýchto okolností by nebola  $\lambda$  jednoznačne určená. Uhlovú frekvenciu odvodíme priamo z Planckovej hypotézy  $\omega = \frac{E}{\hbar}$ .

Na základe týchto transformácií možno každej voľnej častice s energiou  $E$  a hybnosťou  $\vec{p}$  priradiť rovinnú monochromatickú vlnu  $\Psi(\vec{r}, t)$  s uhlovou frekvenciou  $\omega = \frac{E}{\hbar}$  a vlnovou dĺžkou  $\lambda = \frac{h}{p}$ .

$$\Psi(\vec{r}, t) = A \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (E \cdot t - \vec{p} \cdot \vec{r}) \right] \quad (1.1)$$

V kvantovej fyzike sa nazýva de Broglieho vlna a správa sa rovnako ako elektromagnetická vlna v optike t.j. interferuje a difraktuje. Jej fyzikálny význam a vlastnosti pochopíme z nasledovného experimentu:

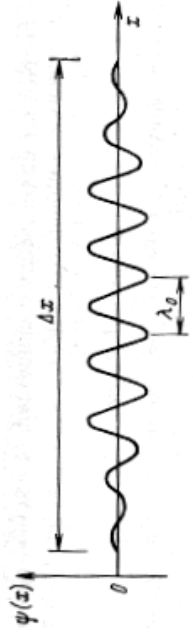
Na tienidlo s dvomi štrbinami dopadá rovnoobežný zväzok fotónov. Podľa Huygensovho princípu sa štrbiny stávajú zdrojmi vln, ktoré interferujú. Interferenčný obraz sa registruje fotografickou platňou a pozostával z množstva malých škvŕn. Každé bodové sčernanie je výsledkom fotochemickej reakcie vyvolanej absorpciou práve jedného fotónu. Mohlo by sa zdať, že vlnové vlastnosti sa

Schopnosť interferovať má teda každý jednotlivý fotón, čo zhrnul lareát Nobelovej ceny Paul Dirac do nasledovných slov: „...each photon interferes only with itself. Interference between different photons never occurs.” V miestach, v ktorých podľa klasickej fyziky vzniká interferenčné maximum dopadne najviac fotónov a hustota sčernania je tam najväčšia. Každý fotón monochromatického žiarenia má rovnakú energiu  $\hbar\omega$  a preto hustota fotónov v určitom mieste je úmerná hustote energie klasického vlnenia t.j. intenzite. Podobné experimenty boli vykonané aj s elektrónmi. Na fotografickej platni sa registroval interferenčný obraz pozostávajúci z malých škvŕn, ktoré sa zhodovali s miestom dopadu elektrónov. Interferenčný obraz elektrónov bol totožný s obrazom rovinné svetelnej vlny s vlnovou dĺžkou  $\lambda = \frac{h}{p}$  a bolo dokázané, že elektrón interferuje sám sebou. Medzi oboma experimentami existuje silná analógia a je celkom prirodzené očakávať, že intenzita de Broglieho vln v ľubovoľnom elemente priestoru  $dx dy dz$  a v čase  $t$ , je úmerná pravdepodobnosti výskytu častice. Intenzita svetla a teda aj intenzita de Broglieho vln je úmerná kvadrátu amplitúdy, ktorý sa dá sa jednoducho vypočítať  $\Psi\Psi^*$ . Takáto interpretácia má štatistický charakter, umožňuje predvídať iba pravdepodobnosť výskytu častíc, ale nedokáže povedať nič konkrétne o jej skutočnej polohe. Vlnová funkcia popisuje v kvantovej mechanike stav systému.

## 1.2 Heisenbergov princíp neurčitosti

Rovinná de Broglieho vlna (1.1) reprezentuje voľnú časticu s presne definovanou hybnosťou  $p$ . Kvadrát amplitúdy je v celom priestore konštantný a podľa pravdepodobnostnej interpretácie  $\psi$  sa častica nachádza všade s rovnakou pravdepodobnosťou. V reálnych fyzikálnych procesoch sú však častice vždy lokalizované v priestore a preto sa harmonické de Broglieho vlny nehodia na ich

popis. Napriek tomu majú v teórii veľký význam, podobne ako monochromatické vlny v optike. Podľa princípu superpozície z nich možno konštruovať vlnové balíky (funkcie), s hustotami pravdepodobnosti rôznymi od nuly v malej oblasti priestoru  $\Delta x$ . Každá takáto funkcia je neperiódická a preto jej nevieme priradiť konkrétnu vlnovú dĺžku  $\lambda$ . Akú má teda častica vlastne hybnosť? Pre jednoduchosť predpokladáme, že v oblasti  $\Delta x$  vlnová funkcia  $\psi$ , reprezentujúca jej stav, pretína  $x$ -ovú os  $2n$ -krát. V oblasti je približne  $2n$  uzlových bodov,  $n$  periód a charakteristická vlnová dĺžka balíka  $\lambda = \frac{\Delta x}{n}$ .



Počet odhadnutých periód je zrejme zaťažený chybou  $\Delta n = \pm \frac{1}{2}$  pretože vlna nemusí začínať alebo končiť v nulovom bode. Ak  $n \gg \Delta n$ , relatívna chyba v určení vlnovej dĺžky  $\frac{\Delta \lambda}{\lambda}$  je malá a možno ju odhadnúť

$$\frac{\Delta \lambda}{\lambda} = \frac{\Delta n}{n} \approx \frac{1}{n} \quad (1.2)$$

Zdifferencovaním de Broglieho vzťahu:

$$\Delta p = \frac{h}{\lambda^2} \Delta \lambda = \frac{h}{\lambda} \frac{\Delta \lambda}{\lambda} \approx \frac{h}{n \lambda} = \frac{h}{\Delta x} \quad (1.3)$$

$$\Delta p \Delta x \approx h \quad (1.4)$$

Na skonštruovanie vlnového balíka potrebujeme podľa (1.3) tým širšie spektrum hybností  $\Delta p$  harmonických de Broglieho vln, čím je vlnová funkcia viacej lokalizovaná. Uvedené úvahy mali kvalitatívny charakter a preto sa pokúsime presnejšou analýzou nájsť rozmery balíkov v  $x$  priestore (daný veľičinou  $\Delta x$ ) a v  $p$  priestore (daný veľičinou  $\Delta p$ ):

Majme časticu s jedným stupňom voľnosti, ktorá sa nachádza v okolí začiatku súradnicovej sústavy. Meraním sme zistili, že jej stredná poloha  $\langle x \rangle = 0$  a stredná kvadratická odchýlka polohy je  $\sigma_x$ . Vlnová funkcia charakterizujúca jej stav, musí byť lokalizovaná v oblasti so šírkou  $\sigma_x$  s výrazným maximom v bode  $x = 0$  a jej tvar sa bude zrejme veľmi podobáť na Gaussovský zvon<sup>1</sup>:

$$\psi(x) = A \exp \left[ -\frac{x^2}{2\sigma_x^2} \right] \quad (1.5)$$

<sup>1</sup>Koeficient  $A$  určíme z normovacej podmienky  $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{1}{\sigma_x \sqrt{\pi}}}$

Vlnový balík  $\psi(x)$  vznikne superpozíciou rovinných vln s presne definovanými hybnosťami  $p$  a amplitúdami  $f(p)$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(p) e^{i\frac{p}{\hbar}x} dp \quad (1.6)$$

Podľa Bohrovej interpretácie kvadrát amplitúdy  $|f(p)|^2 dp$  určuje pravdepodobnosť, s akou leží hybnosť častice v intervale  $p + dp$ . Z teórie Fourierových integrálov pre  $f(p)$  platí:

$$\begin{aligned} f(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-i\frac{p}{\hbar}x} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A \exp \left[ -\frac{x^2}{2\sigma_x^2} \right] e^{-i\frac{p}{\hbar}x} dx = \\ &= \frac{A}{\sigma_p \sqrt{2\pi}} \exp \left[ -\frac{p^2}{2\sigma_p^2} \right] \end{aligned} \quad (1.7)$$

Funkcia  $f(p)$  má Gaussovský tvar s kvadratickou odchýlkou

$$\sigma_p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \frac{\hbar}{2\sigma_x} \quad (1.8)$$

Hodnota  $\Delta x = \sigma_x$  určuje šírku vlnového balíka v premennej  $x$  a preto je mierou neurčitosti určenia polohy častice. Neurčitosť v hybnosti častice je  $\Delta p = \sigma_p$  a podľa (1.8) platí  $\Delta p \Delta x = \frac{\hbar}{2}$ . Vlnový balík sa dôsledkom disperzie zväčšuje (viď. kapitolu), takže vo všeobecnosti:

$$\Delta p \Delta x > \frac{\hbar}{2} \quad (1.9)$$

Vzťah (1.9) sformuloval v roku 1927 Werner Heisenberg a je platný pre vlnové balíky všetkých tvarov. Vyjadruje skutočnosť, že súčin neurčitosti polohy  $\Delta x$  a hybnosti  $\Delta p$  nemôže byť menší ako určitá hranica  $\frac{\hbar}{2}$ . V kvantovej mechanike má veľký význam<sup>2</sup>, spomeňme aspoň niektoré jeho dôsledky:

<sup>2</sup>Niekedy sa používa iný tvar princípu neurčitosti. Mohli by sme napríklad chcieť merať energiu  $E$  vyžiarenú pri atómových procesoch počas doby  $\Delta t$ . Omezená doba, ktorá je k dispozícii, obmedzuje presnosť, s ktorou môžeme merať kmitočet vln. Predpokladáme, že najmenšia neurčitosť v počte vln, s ktorými počítame vo vlnovom kĺbku je jedna vlna a preto je neurčitosť v  $\Delta \nu$  meraného kmitočtu  $\Delta \nu = \frac{1}{\Delta t}$ . Odpovedajúca neurčitosť energie je  $\Delta E = \hbar \Delta \nu = \frac{\hbar}{\Delta t}$ . Je zrejmé, že  $\Delta E \Delta t \approx \hbar$ .

Obsah princípu neurčitosti je iný ako v (1.9), ktorý popisuje súvislosť neurčitosti dvoch fyzikálnych veličín, hybnosti a súradnice v tom istom časovom okamihu. Energetická relácia neurčitosti má však iný význam: Zákon zachovania energie platí v kvantovej mechanike s presnosťou najviac  $\frac{\hbar}{\Delta t}$ .

1, Neexistuje taký stav mikročastice, v ktorom by bolo možné súčasne presne určiť polohu a hybnosť. Čím je menšia nepresnosť v zadaní jednej veličiny ( $p, x$ ), tým je väčšia nepresnosť druhej ( $x, p$ ). Ak častica má konkrétnu hybnosť  $\Delta p = 0$ , potom nie je lokalizovaná pretože  $\Delta x \rightarrow \infty$  a naopak.

2, V kvantovej mechanike trajektória alebo stav pokoja častice nemajú žiaden zmysel. Neexistuje taký stav systému, pri ktorom súčasne platí:  $\Delta x = \Delta p = 0$  (lebo  $\Delta x \Delta p > \frac{\hbar}{2}$ ). Aj pri absolutnej nule sa preto pozoruje „nulová“ kinetická energia napr. vo forme malých kmitov, ktorá sa potvrdila v experimentoch. (James, Brindley a Wood v roku 1929).

Princíp neurčitosti je vlastne prirodzeným matematickým dôsledkom vlnovej reprezentácie častíc. Patrí medzi najdôležitejšie myšlienky kvantovej mechaniky. Aby sme si vytvorili lepšie predstavu o spôsobe jeho fungovania, prečítame niekoľko ilustračných prípadov.

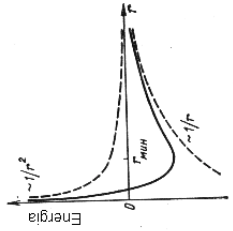
**Príklad 1** Určíme minimálnu energiu a rozmer atómu vodíka.

**Riešenie:** Podľa klasickej elektrodynamiky musí elektrón, obiehajúci okolo jadra, strácať energiu vyžarovaním vo forme elektromagnetického žiarenia. Dôsledkom spomalovania po uplynutí veľmi krátkeho času  $\sim 10^{-9}$  s splynie s protónom. Aparát klasickej fyziky nedokáže vysvetliť stabilitu atómov, ktoré sa odjakživa považovali za najstabilnejšie útvary v prírode. Príčinou jeho zlyhania je skutočnosť, že pristupuje k prírodným javom výhradne prostredníctvom abstraktných pojmov „čistá“ častica, „čistá“ vlna.

V kvantovej fyzike takýto stav nemôže existovať. Zrútený elektrón by mal presne definovanú hybnosť a polohu  $p = 0$ ,  $r = 0 \Rightarrow \Delta x = \Delta p = 0$ , čo je v rozpore s 2. dôsledkom princípu neurčitosti. Atóm sa bude snažiť minimalizovať svoju celkovú energiu  $E$  danú súčtom kinetickej a potenciálnej energie:

$$E = E_k + E_p = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1.10)$$

kde  $p$  a  $m$  je hybnosť a hmotnosť elektrónu,  $r$  vzájomná vzdialenosť elektrónu a protónu. Potenciálnu energiu  $E_p$  možno minimalizovať koncentrovaním elektrónovej vlny k jadrú ( $r \rightarrow 0, \Delta r \rightarrow 0 \Rightarrow E_p \rightarrow -\infty$ ). To má však za následok nežiaduce zvýšenie kinetickej energie, pretože podľa princípu neurčitosti narastá hybnosť systému ( $\Delta p \sim \frac{1}{\Delta r}$ ,  $p \rightarrow \infty \Rightarrow E_k \rightarrow \infty$ ).



Na druhej strane znížením kinetickej energie (resp. hybnosti) sa zväčší rozmer vlnového balíka a vzrastie potenciálna energia. Štruktúra atómu musí byť teda výsledkom kompromisu, pretože minimalizáciou prvého člena v rovnici (1.10) maximalizujeme druhý a opačne. Súbežným meraním hybnosti  $\vec{p}$  a polohy elektrónu  $\vec{r}$  dostaneme štatistický súbor, so strednými hodnotami  $\langle x \rangle$ ,  $\langle \vec{p} \rangle$  a rozptylom  $\Delta x$ ,  $\Delta p$ . Zo symetrie úlohy očakávame, že s rovnakou pravdepodobnosťou sú v štatistickom súbore obsiahnuté kladné a záporné hodnoty hybnosti a preto  $\langle \vec{p} \rangle = 0$ , resp.  $\langle \vec{r} \rangle = 0 \Rightarrow$

$$\langle \Delta p \rangle^2 = \langle p^2 \rangle - \langle \vec{p} \rangle^2 = \langle p^2 \rangle \quad (1.11)$$

a podobne

$$\langle \Delta r \rangle^2 = \langle r^2 \rangle - \langle \vec{r} \rangle^2 = \langle r^2 \rangle \quad (1.12)$$

ustredníme celkovú energiu využitím (1.9):  $\Delta p \geq \frac{\hbar}{\Delta r} = \frac{\hbar}{r}$ :

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{\langle \Delta p \rangle^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \\ &= \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle \end{aligned}$$

Je zrejmé, že energia  $\langle E \rangle$  nadobne svoju minimálnu hodnotu v určitej vzdialenosti  $r_{\min}$  od jadra pre ktorú platí

$$\frac{d\langle E \rangle}{dr} = 0 \quad (1.13)$$

$$-\frac{\hbar^2}{mr^3_{\min}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2_{\min}} = 0 \quad (1.14)$$

$$r_{\min} = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} \approx 0,529 \text{ Å} \quad (1.15)$$

Dosadením  $r_{\min}$  do (??):

$$\langle E \rangle_{\min} \approx \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \right)^2 - e^2 \frac{me^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = -\frac{me^4}{2\hbar (4\pi\epsilon_0)^2} \approx -13,6 \text{ eV} \quad (1.16)$$

Vypočítané hodnoty súhlasia s experimentálnymi údajmi. Energia  $E_{\min}$  zodpovedá ionizačnej energii atómu vodíka a  $r_{\min}$  Bohrovu polomeru. Prechod od kvantovej ku klasickej teórii možno formálne vyjadriť  $\hbar \rightarrow 0$ . Skutočne

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} E_{\min} \approx -\frac{me^4}{2\hbar (4\pi\epsilon_0)^2} \rightarrow -\infty$$

čo zodpovedá „zrútenému“ elektrónu. ◇

**[Príklad 2]** Určme minimálnu energiu harmonického oscilátora.

*Riešenie:* Úvahy sú podobné ako v predchádzajúcom prípade. Celková energia oscilátora je daná súčtom potenciálnej a kinetickej energie

$$E = E_k + E_p = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}$$

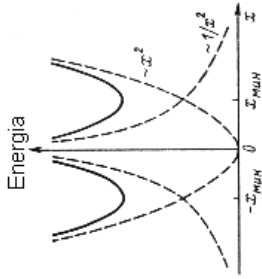
Klasický oscilátor získava minimálnu energiu  $E = 0$  pri nulových hodnotách  $p$  a  $x$ , čo je v rozpore s princípom neurčitosti. Urobme kvantovomechanickú analýzu. Zo symetrie vyplýva  $\langle \Delta x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle$  a  $\langle \Delta p \rangle^2 = \langle p^2 \rangle$ . Stredná hodnota systému :

$$\langle E \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{k \langle x^2 \rangle}{2} \quad (1.17)$$

Podľa vzťahu neurčitosti očakávame  $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$  dosadením do

$$\langle E \rangle \geq \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{2\Delta x} \right)^2 + \frac{1}{2} k (\Delta x)^2 = \frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2} + \frac{kx^2}{2} \quad (1.18)$$

Znáznorníme si závislosť energie oscilátora od polohy



Pre minimálnu energiu v bode  $|x| = x_{\min}$  platí  $\frac{d\langle E \rangle}{dx} = 0$ , t.j.

$$-\frac{\hbar^2}{4mx^3} + kx = 0$$

odkiaľ

$$x_{\min} = \sqrt[4]{\frac{\hbar^2}{4km}}$$

a príslušná energia  $E_{\min} = \frac{1}{2} \hbar \omega$ . Rovnakú hodnotu dostaneme riešením Schr, ktoré uvádzame v dodatku. Najnižšia energia klasického oscilátora zodpovedá stavu absolútneho pokoja t.j.  $x = p = 0$ . Takýto stav je neprípustný, pretože

$\Delta x \Delta p < \frac{\hbar}{2}$  a existencia „nulovej energie“ je čisto kvantovým efektom. Overme princíp korrespondencie a vykonajme limitu  $\hbar \rightarrow 0$ :

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} x_{\min} = \lim_{\hbar \rightarrow 0} \sqrt[4]{\frac{\hbar^2}{4km}} \rightarrow 0 \quad (1.19)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} E_{\min} = \lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{1}{2} \hbar \omega \rightarrow 0 \quad (1.20)$$

Výsledky (1.19), (1.20) zodpovedajú klasickému oscilátoru.  $\diamond$

**[Príklad 3]** Určme minimálnu energiu častice viazanej na úsečku.

*Riešenie:* Celková stredná energia:

$$\langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle U \rangle = \langle T \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} \quad (1.21)$$

Častica je lokalizovaná v oblasti  $\langle \Delta x \rangle = L$ . Podľa princípu neurčitosti  $\langle \Delta p \rangle = \frac{\hbar}{2L}$ . Zo symetrie úlohy zase vyplýva:  $\langle p^2 \rangle = \langle \Delta p \rangle^2$

$$\langle E \rangle_{\min} = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{2L} \right)^2 = \frac{\hbar^2}{8mL^2} \quad (1.22)$$

Elektrón má v základnom stave vždy nenulovú energiu, bez ohľadu na pôvod „väzniciach“ sfl. Tie môžu byť dané tuhosťou stien krabice alebo interakciou elektrónov s inými časticami. Väzbová energia je dôsledok viazanosti elektrónu na danú oblasť. Na docenenie výsledku, urobme aj kvalitatívnu analýzu. Elektrón s hmotnosťou  $m \approx 10^{-27} \text{ g}$  je uväznený v atóme  $\Delta x \approx 10^{-10} \text{ m}$ . Podľa vzťahu (1.22)  $\langle E \rangle_{\min} \sim \text{eV}$ , čo je už rádovo porovnateľné s ionizačnou energiou vodíka 13,6 eV. Na druhej strane minimálna energia pre makroskopickú časticu s hmotnosťou  $m \approx 100 \text{ g}$ , ktorá sa odráža medzi stenami vzdialenými  $a \approx 10 \text{ cm}$ , je zanedbateľná ( $\langle E \rangle_{\min} \approx 10^{-65} \text{ J}$ ) a nemerateľná.  $\diamond$

**[Príklad 4]** Pomocou princípu neurčitosti odhadnime potenciálnu energiu jadrových sfl.

*Riešenie:* Predpokladajme, že nukleón je lokalizovaný vo vnútri jadra  $\Delta r \approx r_0 = 1,2 \cdot 10^{-13} \text{ cm}$ . Jeho hybnosť (z princípu neurčitosti) je rádovo  $p \approx \frac{\hbar}{r_0}$  a zodpovedajúca kinetická energia  $T \approx \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{r_0} \right)^2 \approx 10 \text{ MeV}$ . Nukleón je viazaný

v jadre, nemá dostatočnú energiu na prekonanie jadrových síl a preto jeho celková energia musí byť záporná. Stredná hodnota potenciálnej energie je preto väčšia ako kinetická:

$$-\langle U \rangle \geq T \approx \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{r_0} \right)^2 \approx 10 \text{ MeV} \quad (1.23)$$

Uvedený odhad je veľmi hrubý, napriek tomu umožňuje vytvoriť predstavu o potenciále jadrových síl. Ďalším dôsledkom (1.9) je neexistencia elektrónov v jadre. Ich hmotnosť je asi 2000 krát menšia a stredná potenciálna energia podľa (1.23) asi 2000 krát väčšia v porovnaní s nukleónom. Elektrón by bol v jadre viazaný oveľa silnejšie ako nukleón, čo nesúhlasí s experimentom. Experimentálne údaje potvrdzujú, že elektróny interagujú s jadrom len slabšie a dominantný príspevok je elektromagnetická interakcia.  $\diamond$

**[1.1.]** Poloha ťažiska gule s hmotnosťou  $m = 1 \text{ g}$  a poloha elektrónu je určená s chýbou  $\Delta x = 10^{-5} \text{ cm}$ . Určte neurčitost' v určení jej rýchlosti.

**[1.2.]** Určte na akú kinetickú energiu treba urýchliť elektrón (protón), aby sme mohli sledovať štruktúry s rozmermi  $\sim 1 \text{ fm}$

**[1.3.]** Najjednoduchší spôsob, ako zmerať jednu zo súradníc elektrónu, je použiť ho cez tienidlo s jednou štrbinou o šírke  $d$ . Ukážte, že neurčitost' jeho hybnosti zodpovedá princípu neurčitosti.

**[1.4\*]** Atóm vodíka sa nachádza v základnom stave. Ukážte, že pri pokuse merať trajektóriu elektrónu nevyhnutne narušíme stav atómu.

**[1.5\*]** Predpokladajme, že častica sa v čase  $t = 0$  nachádza s rovnakou pravdepodobnosťou v oblasti  $x \in \langle -a, a \rangle$ . Dokážte, že neurčitost' v hybnosti zodpovedá princípu neurčitosti.

### 1.3 Optika a kvantová mechanika.

Z Maxwellových rovníc, ktoré popisovali šírenie svetelných vln v neabsorbujúcim prostredí sme pre vektor intenzity elektrického poľa  $E$  odvodili vlnovú rovnicu:

$$\Delta E_x - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 E_x}{\partial t^2} = 0 \quad (1.24)$$

Z optiky a nakoniec aj mechaniky vieme, že všeobecné riešenie tejto rovnice je dané superpozíciou tzv. mólov. Módmi sú stojaté vlny, ktorých amplitúda ako

aj fázové konštanty sa určujú z počiatočných podmienok. Dosadením všeobecného výrazu pre stojaté vlny  $E_x = A(x) e^{i\omega t}$ , získame parciálnu pre amplitúdu  $A(x)$  nasledovnú diferenciálnu rovnicu :

$$\Delta A + \frac{\omega^2}{v^2} A = 0 \quad (1.25)$$

Každá častica sa chová ako vlna, ktorej možno priradiť de Broglieho vlnovú dĺžku  $\lambda$  a charakterizovať ju vlnovou funkciou  $\Psi$ . Je prirodzené očakávať, že po vhodnej transformácii (1.25) získame rovnicu popisujúcu stav častíc. Nahradíme intenzitu  $E_x = A(x) e^{i\omega t}$  vlnovou funkciou

$$\Psi = \psi e^{i\omega t} = \psi e^{i \frac{E}{\hbar} t} \quad (1.26)$$

a upravme de Broglieho vzťah:

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{\hbar}{p} \\ v \frac{2\pi}{\omega} &= \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E-V)}} \\ \frac{v}{\omega} &= \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E-V)}} \end{aligned}$$

Po dosadení do (1.25) a príslušných transformácií :

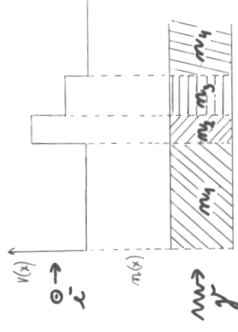
$$\Delta \psi + \frac{2m(E-V)}{\hbar^2} \psi = 0 \quad (1.27)$$

dostávame základný pohybový zákon kvantovej mechaniky tzv. Schrödingerovej rovnice.

Častica pohybujúca sa v silovom poli s meniacim sa potenciálom  $U(x)$  sa teda chová rovnako ako svetelná vlna, prechádzajúca optickým prostredím s indexom lomu

$$n^2 = \frac{c^2}{v^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [E - U] \frac{\hbar^2}{\omega^2} \quad (1.28)$$

Pri kvalitatívnych analýzach možno vždy nahradiť úlohu o pohybe častíc, úlohu o fotónoch, s ktorými máme väčšie skúsenosti.



V prípade absorbujúceho prostredia je index lomu  $n$  komplexný, jeho reálna zložka súvisí s fázovou rýchlosťou vlny a imaginárna s jej absorpciou. Pri totálnom odraze (odraz na povrchu kovu) je kvadrát  $n^2$  rýdzo imaginárny. Medzi optikou a kvantovou mechanikou existuje silná analógia, ktoré sa prejavujú na viacerých úrovniach:

Vlnové vlastnosti svetla sa zreteľne prejavujú pri ohyboch na prekážkach, ktorých rozmery sú porovnateľné s vlnovou dĺžkou svetla. V opačnom prípade možno s väčšou alebo menšou presnosťou použiť metódy geometrickej optiky, vybudovanej na predpoklade, že  $\lambda = 0$ . Ostrá hranica medzi vlnovou a geometrickou optikou samozrejme neexistuje. Vzdďalovaním od podmienky  $\lambda \rightarrow 0$  sa geometrická optika stáva horším priblížením ku skutočnosti. Vlnová optika je všeobecnejšia a geometrická je jej limitou.

Klasická Newtonova mechanika zodpovedá geometrickej optike a predstavuje limitný prípad všeobecnejšej kvantovej mechaniky, ktorá berie do úvahy vlnové vlastnosti častíc  $\lambda$ . Ak však  $\lambda \ll L$ , kde  $L$  je charakteristický rozmer systému, klasická fyzika sa stáva dobrým priblížením pre opis stavov sústavy. Je prirodzené očakávať, že pri zmešňovaní vlnovej dĺžky  $\lambda \rightarrow 0$  kvantová fyzika bude dávať rovnaké výsledky ako klasická. Táto požiadavka sa nazýva *princípom korespondencie*. Dá sa formálne vyjadriť klasickou limitou  $\lim_{\hbar \rightarrow 0}$ , pretože podľa de Broglieho vzťahu vlnové vlastnosti častíc zaniknú keď  $\lim_{\hbar \rightarrow 0} \lambda = \lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{h}{p} \rightarrow 0$ .

Možno nás už viackrát napadla myšlienka, prečo klasická fyzika dobre popisuje makroobjekty. Pre ilustráciu vypočítajme de Broglieho vlnu futbalovej lopty, s hmotnosťou  $m = 0,2 \text{ kg}$ , ktorú sme vystrelili do bránky s rýchlosťou  $v = 15 \text{ ms}^{-1}$ :

$$\lambda = \frac{h}{mv} = 2,2 \cdot 10^{-34} \text{ m}$$

Vzhľadom na ostrú nerovnosť  $\lambda \ll L$  (  $L$  - veľkosť bránky) je klasický popis lopty úplne postačujúci. Lopta v bráne ani nedifraktuje, ani neinterferuje. V mikroskope je však situácia iná. Hmotnosti častíc  $m \approx 10^{-27} \text{ kg}$  a charakteristické rozmery sústav  $L \sim 10^{-15} \text{ m}$  sú oveľa menšie ako v makroskope. Rovnosť  $\lambda \approx L$  je splnená s veľkou pravdepodobnosťou, čo má za následok kvantovo-mechanické prejavu.

Častica napr. elektrón sa podľa našej analógie chová ako fotón a preto ich možno používať na zobrazovanie v elektrónových mikroskopoch. Elektróny sú úrychľované potenciálom  $10^5 \text{ V}$ , čomu zodpovedá vlnová dĺžka  $\lambda \approx 0,004 \text{ nm}$ . Takéto zariadenia majú oveľa lepšiu rozlišovaciu schopnosť v porovnaní s optickými.

[1.6.] Jadrový fyzik má k dispozícii zdroj neutrónov a fotónov s energiou  $100 \text{ eV}$ . Sú tieto zdroje vhodné na skúmanie kryštalografických rovin?

[1.7\*] De Broglieho hypotézu o vlnových vlastnostiach častíc ako prví potvrdili

Davisson a Germer. v roku 1927. Na vzorku monokryštálu z niklu dopadali kolmo elektróny, urýchléné napätím  $U = 54 \text{ V}$ . Detektorom zaregistrovali ostré maximá v rozdelení elektrónov pod uhlom  $50$  stupňov od smeru pôvodného zväzku. Difrakciou rtg. žiarenia na tej istej vzorke v tom istom experimentálnom usporiadaní zistili, že medziatómová vzdialenosť kryštalografických rovin je  $a = 0,091 \text{ nm}$ . Určte vlnovú dĺžku zistenú experimentálne a porovnajte ju s hodnotou vypočítanou z de Broglieho vzťahu.

## 1.4 Bezčasová SchR a jej riešenia

Stav častice v kvantovej mechanike je charakterizovaný vlnovou funkciou 1.26, ktorej amplitúdu  $\psi$  môžeme vypočítat' zo SCHR.

Ak existuje viacej rôznych riešení, odlišujeme ich od seba indexami  $n$ . Hus-toty pravdepodobnosti ani stredné hodnoty veličín nezávisia od času:

$$\Psi_n(x, t) \Psi_n^*(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi^*(x) e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} = \psi_n(x) \psi_n^*(x)$$

a preto takéto stavy nazývame stacionárne. Všeobecné riešenie SchR (1.27) je podľa princípu superpozície dané lineárnou kombináciou jej módov, ktorými sú stacionárne stavy:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (1.29)$$

Počiatočná podmienka predpísaná v čase  $t = 0$  určuje váhové koeficienty  $a_n$  a zastúpenie jednotlivých stacionárnych stavov :

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x) \quad (1.30)$$

Algoritmus pre určenie stavu častice môžeme zhrnúť do troch krokov:

- 1, určíme stacionárne riešenie SCHR  $\psi_n(x)$
- 2, z počiatočnej podmienky nájdeme koeficienty  $a_n$ , aby platilo  $\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x)$ . Vlnové funkcie spravidla spĺňajú vzťah

$$\int \psi_n(x) \psi_m^*(x) dx = \delta_{nm} \quad (1.31)$$

nazývaný podmienkou ortonormality, kde  $\delta_{nm}$  je tzv. Kroneckerov operátor:

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 0 & n \neq m \\ 1 & n = m \end{cases} \quad (1.32)$$

Vynásobením (1.30) funkcí  $\psi_n^*(x)$ , preintegrovaním a využitím podmienky ortonormality (1.32) pre  $a_n$  platí :

$$a_n = \int \Psi(x, 0) \psi_n^*(x) dx \quad (1.33)$$

3, Každý člen lineárnej kombinácie vynásobíme časovým faktorom  $e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$  a jednotlivé zložky nasurperponujeme

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \quad (1.34)$$

Bečasová SchR má veľa riešení, z ktorých mnohé sú z fyzikálneho hľadiska neakceptovateľné. Pretože kvadrát modulu vlastnej funkcie  $\psi(x)\psi^*(x)$  reprezentuje hustotu pravdepodobnosti výskytu častice  $w(x)$ , očakávame, že  $\psi(x)$  je *spojitá* a *normovateľná*. Podľa vety o strednej hodnote pre každú funkciu so spojitými deriváciami medzi bodmi  $b_1$  a  $b_2$ , existuje taký bod  $c \in (b_1, b_2)$  pre ktorý platí :

$$f(b_2) - f(b_1) = f'(c)(b_2 - b_1) \quad (1.35)$$

Nech  $f(x) = \frac{d}{dx}\psi(x)$  potom :

$$\frac{d}{dx}\psi(b_2) - \frac{d}{dx}\psi(b_1) = \frac{d^2}{dx^2}\psi(x) \Big|_{x=c} = \frac{2m}{\hbar^2}(U(c) - E)\psi(c)(b_2 - b_1) \quad (1.36)$$

Zužujme postupne interval  $b_1, b_2 >$  okolo bodu  $c$  tak, aby  $b_1 \rightarrow c^-$  a  $b_2 \rightarrow c^+$ . Ak je potenciálna funkcia ohraničená, potom pravá strana rovnice (1.36) je identicky rovná nule  $(b_2 - b_1) \rightarrow 0$  a derivácia  $\psi$  v bode  $c$  je spojitá  $\frac{d}{dx}\psi(b_2) = \frac{d}{dx}\psi(b_1)$ . *Ohraničenosť potenciálnej energie  $U$  (nie je potrebná jej spojitost) v danom bode zabezpečuje spojitost prvých derivácií  $\psi$ .*

Medzi časticami pôsobia krátkodosahové sily, ktoré sa uplatňujú pri vzniku atómových jadier. Majú prítiažlivý charakter, sú najväčšie aké v prírode poznáme ( $U \approx 20 \text{ MeV}$ ) a ich dosah sa rádovo rovná rozmerom atómových jadier ( $10^{-13} \text{ cm}$ ). V istom priblížení môžno ich potenciál nahradiť jamou. Pomocou tohto modelu dokážeme vysvetliť reálne javy napr. neexistenciu pp a nn jadier, existenciu deutéria, diskretných hodnôt väzbovej energie nukleónov či magických čísel. Rovnakým spôsobom možno aproximovať vzájomnú potenciálnu energiu dvoch molekúl vo vzdialenosti  $r$ . Aj v tomto prípade vlastnosti vlnových funkcií ako aj ich energetických hladín poskytujú reálnu predstavu o pôvodnej systave molekúl. Pravouhlé bariéry zohrávajú zase významnú úlohu pri interpretácii alfa rozpadu, studenej emisie a iných fyzikálnych procesov. V nasledovných kapitolách budeme analyzovať jednotlivé prípady.

## 2.1 Potenciálne steny

V jednorozmernom prípade sa častica s celkovou energiou  $E$  môže pohybovať v oboch smeroch osi  $x$ . Priebeh potenciálnej energie aproximujeme skokovitou funkciou:

$$U = \begin{cases} x < 0 & U = 0 \\ x > 0 & U = V \end{cases} \quad (2.2)$$

Výšetrujme dva prípady  $U < E$  a  $U \geq E$

### 2.1.1 Prípád $U < E$ :

Z hľadiska *klasikkej fyziky* je prípad jasný. Častica dopadá na stenu sprava, s kinetickou energiou

$$T = E = \frac{1}{2} m v_1^2$$

a rýchlosťou

$$v_1 = \sqrt{\frac{2E}{m}}$$

Pri prechode počiatkom súradnicovej sústavy v bode  $x = 0$  začne pôsobiť „spomaľovacia“ sila  $F(x) = -\frac{dU}{dx}$ , ktorá zníži jej rýchlosť na hodnotu:

$$v_2 = \sqrt{\frac{2(E - V)}{m}}$$

Všetky častice majú dostatočnú energiu na prekonanie potenciálového skoku a žiadna z nich sa neodrazí späť. Koefficient odraznosti je  $R = 0$  a priepustnosti  $T = 1$ .

# Kapitola 2

## Jednoduché sústavy

Potenciálna energia systému môže mať vo všeobecnosti veľmi komplikovaný tvar. Na nájdenie úplného riešenia Schr. zatiaľ neexistuje všeobecná metóda. Ide však o čisto matematický problém, ktorého zložitosť závisí od tvaru potenciálnej energie  $U$ . Najjednoduchšie riešenia existujú pre systémy, ktorých potenciálna energia má rôzne konštantné hodnoty v jednotlivých oblastiach priestoru, pričom na rozhraniach oddeľujúcich tieto oblasti sa mení skokom

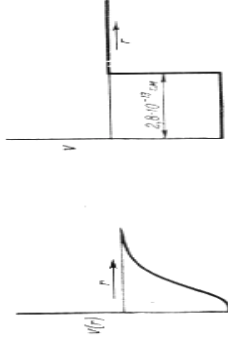


Ide o tzv. pravouhlé potenciálové steny a bariéry. Úlohy tohto typu sú akademického charakteru. V miestach skokov potenciálu, by musela na systém pôsobiť nekonečne veľké sily, čo je nereálne:

$$F = -\frac{dU}{dx} = \lim_{x_2 \rightarrow x_1} \frac{U(x_2) - U(x_1)}{x_2 - x_1} \rightarrow \infty \quad (2.1)$$

Napriek tomu majú z teoretického hľadiska veľký význam, pretože sú aproximáciou zložitejších úloh. Ich jednoduchá matematická reprezentácia umožňuje získať informácie o reálnych javoch, ktoré simulujú. Uvedme niekoľko príkladov:

Vzájomná potenciálna energia medzi protónom a neutrónom má nasledovný tvar:



Analýzujeme úlohu z hľadiska *kvantovej mechaniky*. Podľa optického modelu sa elektrón chová ako svetelná vlna, prechádzajúca dvoma optickými prostrediami s indexami lomu

$$n_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [E] \frac{c^2}{\omega^2} \quad n_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [E - U] \frac{c^2}{\omega^2}$$

$n_1 > n_2$ . Na optickom rozhraní (v bode  $x = 0$ ) nastáva čiastočný odraz svetla. Časť svetelnej vlny vstupuje do prostredia II, druhá časť sa odráža. Pretože druhé prostredie je opticky redšie, zníži sa rýchlosť šírenia svetelnej vlny. Na základe tejto analógie očakávame v priestore I existenciu dvoch de Broglieho vln: dopadajúcej a odrazenej, v oblasti II iba vlnu prechádzajúcu. Potenciálna stena teda prepustí niektoré častice a teda  $R \neq 0$ .

Po kvalitatívnej analýze pristúpme aj ku kvantitatívnemu riešeniu Schr a overme, či naša intuícia bola správna. V oblasti I má Schr tvar

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi(x) = 0 \quad (2.3)$$

a riešenie

$$\psi_1 = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad (2.4)$$

Vpravo od osi, teda v oblasti II, je

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)]\psi(x) = 0 \quad (2.5)$$

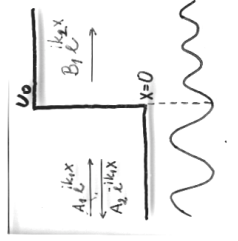
a jej riešenie

$$\psi_2 = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} \quad (2.6)$$

kde

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} U \quad k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [E - U] \quad (2.7)$$

Kompletnú vlnovú funkciu dostaneme po prenásobení  $\psi$  časovým faktorom  $e^{-iEt/\hbar}$ .



De Broglieho vlna  $Ae^{ik_1x}e^{-iEt/\hbar}$  reprezentuje častice dopadajúce na bariéru zľava a  $Be^{-ik_1x}e^{-iEt/\hbar}$  odrazené častice od bariéry. Vlnová funkcia  $Ce^{ik_2x}e^{-iEt/\hbar}$  opisuje častice, ktoré prešli cez bariéru a  $De^{-ik_2x}e^{-iEt/\hbar}$  častice, ktoré dopadali na bariéru zľava. V našom prípade je  $D = 0$ , lebo častice na bariéru sprava nedopadajú. Potom

$$\psi_2 = Ce^{ik_2x} \quad (2.8)$$

Riešenia získané pre tieto oblasti musíme „zošit“ a tak zabezpečiť spojitosť a jednoznačnosť výslednej vlnovej funkcie:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow A + B = C \quad (2.9)$$

Navyše v bodoch nespojitosti s konečným skokom potenciálu je spojitá aj prvá derivácia:

$$\left(\frac{d\psi_I}{dx}\right)_{x=0} = \left(\frac{d\psi_{II}}{dx}\right)_{x=0} \Rightarrow k_1(A - B) = k_2C \quad (2.10)$$

Úpravou rovníc (2.9, 2.10) vypočítame neznáme amplitúdy  $A, B, C$ , ktoré súvisia s počtom častíc:

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A \quad C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A$$

Hustota pravdepodobností častíc pohybujúcich sa na bariéru zľava je podľa Bohrovej interpretácie vlnovej funkcie:

$$\psi_{IA}^*\psi_{IA} = (Ae^{ik_1x})^* Ae^{ik_1x} = A^2 \quad (2.11)$$

Hustota pravdepodobností častíc pohybujúcich sa doľava po odraze na bariére bude:

$$\begin{aligned} \psi_{IB}^*\psi_{IB} &= (Be^{ik_1x})^* Be^{ik_1x} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} Ae^{-ik_1x}\right)^* \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} Ae^{-ik_1x} \\ &= A^2 \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 \end{aligned} \quad (2.12)$$

Podiel intenzity odrazenej a dopadajúcej de Broglieho vlny udáva podobne ako v optike koeficient odraznosti :

$$R = \frac{\psi_{IB}^*\psi_{IB}}{\psi_{IA}^*\psi_{IA}} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 \quad (2.13)$$

Zo zákona zachovania počtu častíc ďalej platí :

$$T = 1 - R = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} \quad (2.14)$$

Koeficienty odraznosti a priepustnosti častíc sú identické s koeficientami  $R$  a  $T$  získanými z Fresnelových vzťahov pri kolmom dopade svetelných vln na optické rozhranie.

Možno ste si všimli, že koeficient priepustnosti  $T$  väčšinou počítame zo zákona zachovania počtu častíc t.j. z rovnice  $T = 1 - R$ . Ak ho však vypočítame ako pomer medzi hustotami pravdepodobnosti prechádzajúcich a dopadajúcich častíc

$$T \neq \frac{\psi_{IC}^* \psi_{IC}}{\psi_{IA}^* \psi_{IA}} = \frac{C^2}{A^2} = \frac{2k_1}{k_1 - k_2} \quad (2.15)$$

dosiahneme iný výsledok. Ako je to možné? Ktorý postup je správny? Zdanlivý spor vznikol dôsledkom nepochopenia koeficientu  $T$ . Priepustnosť častíc musí byť definovaná ako pomer medzi hustotami toku  $j$  prechádzajúcich a dopadajúcich častíc. Ľubovoľnou plochou  $dS$  za čas  $dt$  prejde toľko častíc, koľko sa ich nachádza v objeme  $dV$ :

$$\begin{aligned} \psi \psi^* dV &= \psi \psi^* S v dt \Rightarrow j = \frac{dN}{dS dt} = \psi \psi^* v \\ T &= \frac{\psi_{IC}^* \psi_{IC} v_C}{\psi_{IA}^* \psi_{IA} v_A} = \frac{\psi_{IC}^* \psi_{IC} v_C k_2}{\psi_{IA}^* \psi_{IA} v_A k_1} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)} \end{aligned} \quad (2.16)$$

čo vedie k rovnakému výsledku ako (2.14). Všimnime si, že ak rýchlosť častice je v oboch prostrediach rovnaká, koeficient priepustnosti je daný pomerom medzi hustotami pravdepodobnosťami v ostatných prípadoch pomerom medzi hustotami tokov pravdepodobnosti.

Odrasť častíc na rozhraní je čisto kvantovo-mechanickým efektom, ktorý nemá žiadnu analógiu v klasickej fyzike a je dôsledkom vlnovej reprezentácie častíc.

Za kvantový extrém možno považovať prípad, keď  $U < 0$  a  $E \ll |U|$ . Klasická častica preletí nad schodom so značným zvýšením rýchlosti. V kvantovej mechanike pre vlnové vektory de Broglieho vln z rovnice (2.7) vyplýva:

$$k_1 \ll k_2$$

a potom  $B \approx -A$ ,  $C \approx 0$  čo zodpovedá totálnemu odrazu  $R = 1$ . Je to úplný opak chovania klasických častíc. Akokoľvek sa môže zdať výsledok neuveriteľným, uvedený jav sa pozoruje v jadrovej fyzike pri odraze veľmi pomalých neutrónov na prudkom poklese potenciálu v oblasti povrchu atómových jadier.

Na druhej strane sa kvantovo-mechanické efekty nebudú prejavovať pri klasickej limite  $E \gg V$ , pretože situácia je podobná s klasickou:  $k_1 \approx k_2$  a  $B \approx 0$ ,  $C \approx A$ .

### 2.1.2 Prípad $E < V$ :

Podľa klasickej fyziky je oblasť II z energetického hľadiska nedostupná. Častica sa na stene odrazí a začne sa pohybovať v opačnom smere osi  $x$ , rýchlosťou  $-v_1$ .

Potenciálová stena sa chová ako dokonalé zrkadlo s koeficient odraznosti  $R = 1$  a priepustnosti  $T = 0$ .

Skúmame pohyb častice z hľadiska kvantovej fyziky. Pretransformujeme najskôr úlohu s časticou na úlohu so svetelnou vlnou šíriacou sa dvoma optickými prostrediami s indexami lomu  $n_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [E]^2$  a  $n_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [E - U]^2$ . Keďže  $E < U$ , druhému prostrediu zodpovedá index lomu s rýdzo imaginárnym kvadrátom  $n_2^2$ . S rovnakou situáciou sme sa stretli v optike pri totálnom odraze svetla. Zistili sme, že do opticky redšieho prostredia preniká nehomogénna povrchová vlna, ktorej amplitúda exponenciálne klesá. V prostredí nedochádzalo k absorpcii a svetelná energia sa celá „vrátila“ do pôvodného prostredia. Koeficient odraznosti  $R = 1$  a priepustnosti  $T = 0$ . Podľa optického modelu budeme predpokladať, že častice sa chovajú ako svetelné vlny a preto preniknú aj do „zakázaných zón“ II s nemulovou pravdepodobnosťou, ktorej hodnota s hĺbkou exponenciálne klesá. V prostredí I očakávame dopadajúcu aj odrazenú de Broglieho vlnu a v prostredí II iba nehomogénnu. Overme tieto hypotézy riešením Schr. Pre oblasť I má Schr tvar

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x) = 0 \quad (2.17)$$

a riešenie

$$\psi_1 = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} \quad (2.18)$$

V oblasti II je

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] \psi(x) = 0 \quad (2.19)$$

a jej riešenie

$$\psi_{II} = C e^{-k_2 x} + D e^{k_2 x} \quad (2.20)$$

kde

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} U \quad \text{a} \quad k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U - E)$$

Je zrejmé, že vlnová funkcia  $A e^{ik_1 x} e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$  opisuje dopadajúce častice na bariéru zľava a  $B e^{-ik_1 x} e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$  odrazené častice od bariéry. V oblasti II je však situácia odlišná. Riešenie  $D e^{k_2 x}$  reprezentuje nehomogénnu vlnu, ktorej amplitúda a kvadrát monotónne rastie so vzdialenosťou. Hustota pravdepodobnosti sa stáva pre  $x \rightarrow \infty$  nenormovateľnou a nemôže preto popisovať reálne častice. V tomto prípade  $D = 0$  a funkcia

$$\psi_{II} = C e^{-k_2 x} \quad (2.21)$$

Zároveň treba zabezpečiť spojitosť prvých a druhých derivácií v bode  $x = 0$ :

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow A + B = C \quad (2.22)$$

$$\left(\frac{d\psi_I}{dx}\right)_{x=0} = \left(\frac{d\psi_{II}}{dx}\right)_{x=0} \Rightarrow ik_1 A - ik_1 B = k_2 C \quad (2.23)$$

Riešením (2.22) a (2.23) pre amplitúdy de Broglieho vln dostaneme:

$$B = \frac{ik_1 + k_2}{ik_1 - k_2} A \quad (2.24)$$

$$C = \frac{2ik_1}{ik_1 - k_2} A$$

Častice sa na bariére podobne ako v klasickej fyzike odrazia so 100% pravdepodobnosťou:

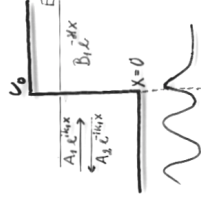
$$R = \frac{\psi_{IB}^* \psi_{IB}}{\psi_{IA}^* \psi_{IA}} = \left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}\right)^* \left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}\right) \quad (2.25)$$

$$= \left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1 - ik_2}\right) \left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}\right) = 1 \quad (2.26)$$

Aj v tomto prípade však existuje zásadný rozdiel medzi chovaním klasických a kvantových častíc. Vypočítajme hustotu pravdepodobnosti ich výskytu v oblasti bariéry t.j. v „zakázananej“ zóne :

$$w_2(x) = |\psi_2|^2 = |C|^2 e^{-2k_2 x} = \frac{4k_1^2}{k_1^2 + k_2^2} \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)} x\right] \quad (2.27)$$

Táto pravdepodobnosť môže byť v blízkosti hrany schodu relatívne veľká, s rastúcou vzdialenosťou však exponenciálne klesá (obr.??).



Základným rozdielom medzi kvantovými a klasickými časticami je ich hmotnosť. Pre klasické objekty s hmotnosťou niekoľkonásobne vyššou ako kvantových je hustota pravdepodobnosti ich výskytu s vysokou presnosťou v celom priestore  $x > 0$

$$\lim_{m \rightarrow \infty} w_2(x) = 0$$

Hodnotu  $w_2(x)$  ovplyvňuje aj rozdiel  $U - E$ . V limitnom prípade  $U \rightarrow \infty$  sa všetky častice správajú ako klasické a odrážajú sa od steny, bez toho, že by do nej prenikli:

$$\lim_{U \rightarrow \infty} w_2(x) = 0$$

Ako je to v kvantovej mechanike s kinetickou energiou  $T$ ? Podľa vzťahu  $T = E - U$  vo vnútri schodu ( $x > 0$ ) dosahuje záporné hodnoty. Dôsledkom princípu neurčitosti nemožno celkovú energiu presne rozdeliť na kinetickú a potenciálnu. Pre ilustráciu predpokladajme, že stredná oblasť, do ktorej častica presakuje, je daná vzdialenosťou  $d \sim \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(U-E)}}$ . Jej poloha je určená s presnosťou  $\Delta x < d$ , čomu zodpovedá podľa princípu neurčitosti:

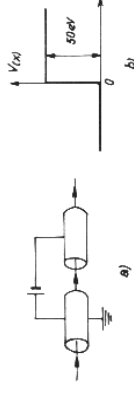
$$\Delta p > \frac{\hbar}{2d} \Rightarrow \Delta T > \left(\frac{\hbar\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}\right)^2 \frac{1}{2m} = (U-E) \quad (2.28)$$

Chyba v meraní kinetickej energie je väčšia ako energia chýbajúca na prekonanie bariéry.

Schopnosť častice preniknúť do energeticky zakázanej zóny ako aj čiastočný odraz na potenciálovom schode je čisto kvantovomechanický jav, ktorý sa nedá vysvetliť klasickou fyzikou. Kvantovomechanické javy sa odohrávajú na atómovej a subatómovej úrovni a preto nemáme s nimi žiadne skúsenosti. Optika, ako sme sa práve presvedčili, je veľmi vhodným sprostredkovateľom na ich predikciu a pochopenie.

**2.1.** Vypočítajte priezračnosť potenciálovej steny s potenciálom  $U$ , keď častica nalietaťava sprava doľava a porovnaj s koeficientom  $T$ , keď sa pohybuje naopak (zľava doprava).

**2.2.** Zväzok elektrónov letí s kinetickou energiou 80 eV v uzemnenej kovovej trubici.



Elektróny potom vletia do druhej trubice, ktoré má potenciál  $-50$  V vzhľadom na Zem. a) Koľko elektrónov sa odrazí späť? b) Aká časť elektrónového zväzku sa odrazí v prípade keď trubica má potenciál 50 eV. b. Aké množstvo elektrónov sa odrazí, keď trubica B bude mať potenciál  $U = -100$  eV.

## 2.2 Potenciálové valy

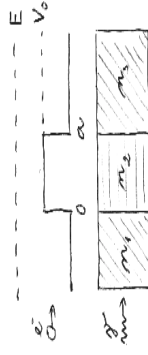
Pod jednorozmerným potenciálovým valom budeme rozumiť taký prípad, keď priebeh potenciálnej energie má nasledovnú štruktúru :

$$U = \begin{cases} U = 0 & x < 0 \\ U = U_0 & 0 \leq x \leq a \\ U = 0 & x > a \end{cases} \quad (2.29)$$

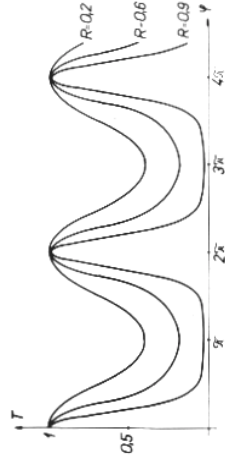
Ak  $E < U_0$ , hovoríme o podbariérových prechodoch, ak  $E < U_0$ , o nadbariérových prechodoch. Vo fyzike sa tieto prechody vyskytujú veľmi často, preto ich v nasledovných kapitolách zanalyzujeme.

### 2.2.1 Nadbariérový prechod $E > U$

Podľa *klasikkej fyziky* má častica dostatočnú energiu na prekonanie potenciálového valu a preto koeficient priepustnosti  $T = 1$ . V *kvantovej fyzike* je situácia ekvivalentná s prechodom svetelnej vlny cez tri optické prostredia s indexami lomu  $n_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [E]$ ,  $n_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [E - U]$ ,  $n_3^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [E]$

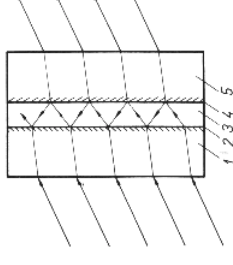


Na každom rozhraní nastáva čiastočný odraz a lom svetla. Koeficienty priepustnosti a odraznosti jednotlivých rozhraní sme analyzovali v predchádzajúcej kapitole. Túto sústavu už poznáme z optiky. Je zhodná s Fabry-Perotov interferometrom, resp. interferenčnými filtermi, ktoré umožňovali získavať svetlo z úzkého intervalu vlnových dĺžok. Koeficient priepustnosti závisel od vzájomného fázového rozdielu  $\varphi$  interferujúcich lúčov ako aj koeficientu odraznosti  $R$



Na základe optickej analógie očakávame podobný rezonančný charakter koeficientu priepustnosti častíc. Kvantovo-mechanické odvodenie  $T$  zo Schr je náročné (viď. dodatok) a preto ho odvodíme priamo z optického modelu.

Sledujme teda svetelnú vlnu (de Broglieho) dopadajúcu na prvé rozhranie. V bode  $x = 0$  sa časť odrazí a časť prejde do prostredia II. Prechádzajúca vlna narazí na optické rozhranie v bode  $x = a$  a znovu sa čiastočne odrazí a časť prejde do III. Odrazená vlna sa vracia na rozhranie  $x = 0$ , kde opäť nastáva čiastočný odraz. Celý proces sa opakuje nekonečne veľa krát. Pri každom prechode sa amplitúda vlny zmenší  $t$ -krát (2.13) a pri odraze  $r$ -krát (2.14). Ak chceme určiť výslednú intenzitu svetelnej vlny v prostredí III, musíme zohľadniť mnohozvukovú interferenciu všetkých vln, ktoré sem prenikli dôsledkom čiastočných odrazov na jednotlivých optických rozhraniach. Predpokladajme, že amplitúda dopadajúcej vlny je  $A$ .



Je zrejmé, že dva susedné zväzky sa navzájom líšia vždy o rovnaký dráhový rozdiel  $\Delta = 2a$ , ktorému zodpovedá fázový rozdiel

$$\varphi = k\Delta = \sqrt{\frac{2m(E - V)}{\hbar^2}} 2a \quad (2.30)$$

Za vlnový vektor  $k$  sme dosadili  $k_2$  z rovnice (2.7). Výslední amplitúdu vlnenia v prostredí III nájdeme superpozíciou parciálnych de Broglieho vln :

$$A_t = A_{t1} + A_{t2} + \dots A_{tN} \quad (2.31)$$

Pretože každý ďalší zväzok vychádza z prostredia II po dvoch ďalších odrazoch, amplitúdy susedných zväzkov sa líšia  $r^2$  krát:

$$A_t = (tt + ttr^2e^{i\varphi} + \dots ttr^{(2N-1)}e^{i(N-1)\varphi}) A \quad (2.32)$$

Ide o geometrický rad s kvocientom  $q = |r^2e^{i\varphi}| < 1$ , ktorý pre  $N \rightarrow \infty$  konverguje k hodnote

$$A_t = \frac{tt}{1 - r^2e^{i\varphi}} A$$

Hustotu pravdepodobnosti prechádzajúcich častíc vypočítame z kvadrátu amplitúdy:

$$A_t A_t^* = \frac{(tt)^2 A^2}{(1 - r^2e^{i\varphi})(1 - r^2e^{-i\varphi})} = \frac{(tt)^2 A^2}{1 + r^4 - 2r^2 \cos \varphi} \quad (2.33)$$

Použitím nasledovných identít:  $\cos \varphi = 1 - 2 \sin^2 \left( \frac{\varphi}{2} \right)$ ,  $r^2 = R$ ,  $t^2 = T$  a  $r^2 + t^2 = 1$  prejde vzťah (2.33) do tvaru:

$$T_j = \frac{A_r A_t^*}{A^2} = \frac{1}{1 + \frac{4r^2}{(1-r^2)^2} \sin^2 \left( \frac{\varphi}{2} \right)} = \frac{1}{1 + \frac{4R}{(1-R)^2} \sin^2 \left( \frac{\varphi}{2} \right)} \quad (2.34)$$

Po dosadení (2.13), (2.30) do (2.34) pre koeficient priepustnosti pri nadbárirovom prechode platí vzťah

$$T_j = \frac{1}{1 + \frac{U_0^2}{4E(E-U_0)} \sin^2 \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar}} a} \quad (2.35)$$

Najvýznamnejším javom je oscilujúci charakter koeficientu priepustnosti  $T_j$ , ktorý je dôsledkom konštruktívnej a deštruktívnej interferencie de Broglieho vln.  $T_j$  nadobúda maximálnu hodnotu ( $T_j = 1$ ) vtedy, keď je menovateľ najmenší, teda keď

$$\sin^2 \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar}} a = 0 \quad (2.36)$$

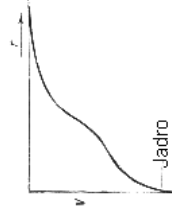
$$\sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar}} a = n\pi \quad (2.37)$$

Z rovnice (2.37) vyplýva, že častice s energiou

$$E = \frac{1}{2m} \left( \frac{n\pi\hbar}{a} \right)^2 + U_0 \quad (2.38)$$

peniknú so 100 % pravdepodobnosťou cez potenciálnu bariéru, podobne ako v klasickej fyzike.

Rezonačný charakter priepustnosti častíc možno sledovať pri rozptyle elektrónov na atómoch vzácných plynov akými sú neón, argón. Potenciálna energia elektrónov vo vnútri atómov sa dá v prvom priblížení aproximovať pravouhlou jamou.



Pre elektróny s energiami  $E = 0, 1 \text{ eV}$  je táto jama priezračná  $T_j = 1$ . Pravdepodobnosť ich rozptylu bude v tomto prípade oveľa menšia ako pre iné atómy, resp. tie isté atómy s inými energiami elektrónov. Uvedený efekt sa nazýva Ramzauerov efekt a bol experimentálne aj potvrdený.

Nadbárirové prechody sa dajú tiež využiť na filtrovanie častíc s príslušnými energiami, podobne ako v optike interferenčné filtre na získavanie svetla v úzkom intervale vlnových dĺžok.

## 2.2.2 Podbárirový prechod $U > E$

Častice dopadajúce na bariéru sa podľa klasickej fyziky úplne odrážajú, pretože nemajú dostatok energie na jej prekonanie. V kvantovej mechanike je situácia oveľa zaujímavejšia. So špeciálnym prípadom podbárirového prechodu sme sa stretli pri analýze polyhu častíc cez potenciálový schod. Schod je vlastne potenciálová bariéra s nekonečnou šírkou. Zistili sme, že pravdepodobnosť výskytu častice v oblasti  $x > 0$  exponenciálne klesá. Z jej priebehu je zrejmé, že pri konečnej šírke bariéry  $a$  bude pravdepodobnosť nájdenia častice v bode  $x = a$  nenulová. V prvom priblížení možno koeficient priepustnosti  $T$  možno v prvom priblížení odhadnúť zo vzťahu (2.27)

$$T = \frac{4k_1^2}{k_1^2 + k_2^2} \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U-E)} a \right] \quad (2.39)$$

Pretransformujeme úlohu do reči svetelných vln. Index lomu v prostredí II bude rýchlo imaginárny ( $U > E$ ) a na rozhraní I - II nastáva totálny odraz. Ak sa v blízkosti rozhrania umiestní ďalší povrch, svetelná vlna preniká aj do tohto materiálu (experiment NaCl). Hrúbka prostredia musí však rádozo zodpovedať vlnovej dĺžke použitého svetla. Podľa optického modelu očakávame, že sa častice presiaknu aj mimo pôvodnej oblasti I. Ďalšie úvahy spolu s matematickými úpravami potrebnými na určenie koeficient  $T$  sú totožné s úvahami z nadbárirového prechodu a preto ich nebudeme opakovať. Priamo použijeme odvodený vzťah (2.34), ktorý aktualizujeme pre náš prípad:

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} &= 1 + \frac{4r^2}{(1-r^2)^2} \sin^2 \left( \frac{\varphi}{2} \right) = 1 + \frac{4 \left( \frac{\sqrt{E-i\sqrt{V-E}}}{\sqrt{E+i\sqrt{V-E}}} \right)^2 \sin^2 \frac{\varphi}{2}}{\left( 1 - \left( \frac{\sqrt{E-i\sqrt{V-E}}}{\sqrt{E+i\sqrt{V-E}}} \right)^2 \right)^2} \\ &= 1 + \frac{4 \left( \sqrt{E-i\sqrt{V-E}} \right)^2 \left( \sqrt{E+i\sqrt{V-E}} \right)^2 \sin^2 \frac{\varphi}{2}}{\left( \left( \sqrt{E+i\sqrt{V-E}} \right)^2 - \left( \sqrt{E-i\sqrt{V-E}} \right)^2 \right)^2} \end{aligned} \quad (2.40)$$

Čitateľa a menovateľa sme upravili podľa vzťahu:  $A^2 - B^2 = (A-B)(A+B)$

$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{4(V)^2}{\left( 4i\sqrt{V-E}\sqrt{E} \right)^2 \sin^2 \frac{\varphi}{2}} \quad (2.41)$$

Argument sínusu je dôsledkom komplexného vlnového vektora tiež imaginárny:

$$\varphi = 2ka = 2\sqrt{\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}} a = i\sqrt{\frac{2m(V-E)}{\hbar^2}} = i\gamma \quad (2.42)$$

Upravme funkciu sínus podľa Eulerovho vzťahu

$$\sin i\gamma = \frac{e^{-\gamma} - e^{\gamma}}{2i} = -\frac{\sinh \gamma}{i}$$

a dosadíme do rovnice (2.41)

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} &= 1 + \frac{V^2}{-4E(V-E)} \left( -\frac{1}{i} \sinh \sqrt{\frac{2m(V-E)}{\hbar^2} a} \right)^2 = \\ &= 1 + \frac{V^2}{4E(V-E)} \sinh^2 \sqrt{\frac{2m(V-E)}{\hbar^2} a} \end{aligned} \quad (2.43)$$

V prípade širokej a vysokej baréry

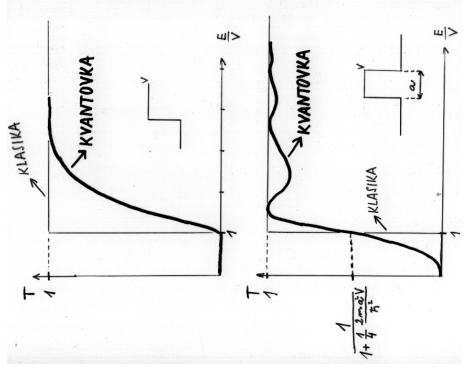
$$\sqrt{\frac{2m(V-E)}{\hbar^2} a} \gg 1$$

je koeficient priepustnosti:

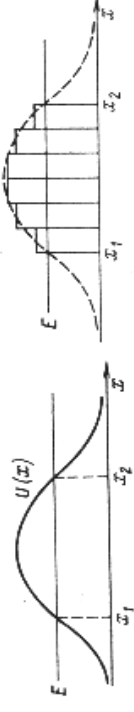
$$\frac{1}{T} \approx \frac{V^2}{16E(V-E)} \exp \left( 2 \sqrt{\frac{2m(V-E)}{\hbar^2} a} \right) \quad (2.44)$$

Jav, pri ktorom je častica schopná prekonať bariéru konečnej hrúbky, napriek tomu, že jej energia je menšia ako potenciálna, nazývame *tunelovým javom*. Uplatňuje sa v mnohých experimentoch napr. alfa rozpad nestabilných atómových jadier, približovanie jadier deutéria a trícia pri termojadrových reakciách, studená emisía a pod.

Na obrázku sú zobrazené priebehy koeficientov priepustnosti  $T$  v závislosti od energie pre pravouhlé steny a bariéry.



Doteraz sme podrobne skúmali prechod častíc cez potenciálnu bariéru najjednoduchšieho typu (pravouhlú). Optickou analógiou však môžeme odhadnúť  $T$  pre ľubovoľný typ bariér. Rozdelíme oblasti, v ktorej má  $E < U$  na infinitesimálne časti s hrúbkou  $dx$ . V každej takejto oblasti môžeme považovať  $U$  za konštantu.



Úloha je ekvivalentná prechodu svetelnej vlny sústavou planoparalelných dosťičiek s meniacim sa indexom lomu

$$n(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} [U(x) - E]} \frac{c^2}{\omega^2}$$

Na každom optickom rozhraní nastáva čiastočný odraz a celkový koeficient priepustnosti bude zrejme daný

$$T \approx T_1 T_2 \dots T_N$$

po zlogaritmovaní:

$$\ln T \approx \ln T_1 + \ln T_2 + \dots + \ln T_N$$

Pre pravouhlé bariéry sme odvodili

$$\begin{aligned} \ln T_N &\approx -2 \sqrt{\frac{2m[U(x) - E]}{\hbar^2}} dx_N \\ \ln T &\approx \sum_N -2 \sqrt{\frac{2m[U(x) - E]}{\hbar^2}} dx_N \end{aligned} \quad (2.45)$$

Vzhľadom na malosť  $dx_N \rightarrow 0$  suma v rovnici (2.45) prechádza na integrál:

$$\ln T \approx -2 \int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{\frac{2m[U(x) - E]}{\hbar^2}} \quad (2.46)$$

kde hranice  $x_2$ ,  $x_1$  sú krajné body podbarovej oblasti pre ktoré platí:

$$U(x_1) = E \quad \text{a} \quad U(x_2) = E$$

Odvođený výraz (2.46) je hrubým kvalitatívnym priblížením zoslabovania amplitúdy vlnovej funkcie pre ľubovoľný priebeh potenciálnej energie  $U(x)$ . Použijeme ho pri interpretácii alfa rozpadu, ako aj studenej emisie elektrónov v elektrickom poli.

Priezačnosť bariéry  $T$  (2.46) závisí predovšetkým od jej šírky  $x_2 - x_1$ , energie  $E$  a hmotnosti častice  $m$ . Častica s menšou hmotnosťou preniká cez bariéru ľahšie. Koeficient  $T$  so vzrastaním energie narastá, prinajmenšom z dvoch dôvodov. Hodnota podintegrálnej funkcie sa znižuje a šírka bariéry sa zužuje (t.j. body  $x_1$ ,  $x_2$  sa k sebe približujú).

2.2.3 Aplikácie podbáriového prechodu

Teória alfa rozpadu.

Spontánny  $\alpha$  ropad je proces, pri ktorom sa jadro zjavuje exitačnej energie, resp. dosahuje stabilnejšiu konfiguráciu. Schematicky ho možno zapísať:

$${}^AX_Z \rightarrow {}^{A-4}_{Z-2}Y + {}^4_2\text{He} \tag{2.47}$$

Tento proces prebieha iba vtedy, keď je dovolený z hľadiska relativistického zákona zachovania energie

$$c^2 [M(A, Z) - M(4, 2) - M(A - 4, Z - 2)] > 0 \tag{2.48}$$

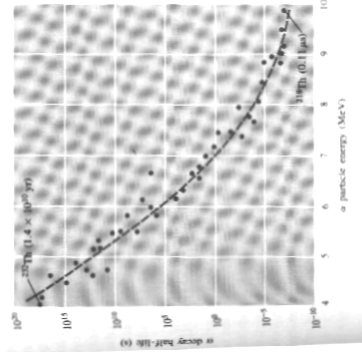
kde  $M$  sú pokojové hmotnosti zúčastnených jadier. Po dosadení príslušných hmotností zistíme, že všetky ťažké izotopy z konca periodickej tabuľky  $A \approx 140$  sú nestabilné a emitujú  $\alpha$  častice s relatívne úzkého intervalu energií  $E \approx 3 - 9$  MeV. Na druhej strane ich polčasy rozpadu sa menia v širokom intervale: od zlomkov sekundy  $10^{-7}$  s až po hranice merateľnosti  $10^{10}$  s :

| Jadro                    | Polčas rozpadu $\alpha$<br>[s] | $E_\alpha$<br>[MeV] |
|--------------------------|--------------------------------|---------------------|
| ${}^{212}_{84}\text{Po}$ | $3,04 \cdot 10^{-7}$           | 8,776               |
| ${}^{211}_{84}\text{Po}$ | 0,52                           | 7,434               |
| ${}^{224}_{88}\text{Ra}$ | $3,14 \cdot 10^5$              | 5,681               |
| ${}^{241}_{95}\text{Am}$ | $1,48 \cdot 10^{10}$           | 5,532               |

V roku 1911 Geiger a Nuttall štúdiom rádioaktívnych rozpadov objavili empirické pravidlo medzi polčasom rozpadu jadier  $T_{1/2}$  a energiou  $E$  emitovaných  $\alpha$  častíc:

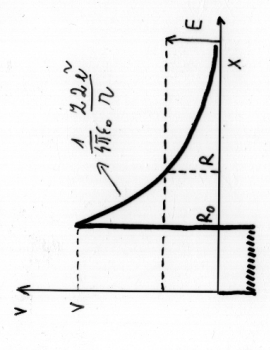
$$\ln T_{1/2} = AE^{-1} + B \tag{2.49}$$

Na obrázku sú porovnané experimentálne údaje, fitované s rovnicou (2.49).



Teoretické vysvetlenie empirického pravidla bolo rozpracované v roku 1928 Gamowom a nezávisle Gurneyevom a Condonem. Ide o kvantovo-mechanický jav tunelový efekt, s ktorým sme sa stretli v predchádzajúcej kapitole..

Znáornime závislosť potenciálnej energie alfa častice od stredy ťažkého jadra.



Vo vnútri jadra prevládajú príťažlivé sily, čo sa prejavuje prudkým poklesom potenciálnej energie. Ak predpokladáme, že väzbová energia na jeden nukleon je približne 7 MeV, potom hĺbka potenciálového poklesu je okolo 30 MeV. Mimo jadra je účinok jadrových síl zanedbateľný a začínajú prevládať odpudivé elektrostatické sily, ktorých potenciál so vzdialenosťou klesá podľa vzťahu

$$U = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \tag{2.50}$$

Dosadením do (2.50) pre stredne ťažké jadro  ${}^{226}\text{Ra}$  je  $U \approx 26$  MeV. Bežné častice alfa majú energiu od 3 do 9 MeV a na opustenie jadra im chýba približne 16-21 MeV. To je dôvod, prečo produkcia alfa častíc neprebíha okamžite, hoci z energetického hľadiska je pre jadro výhodná. Častica sa v jadre neustále pohybuje a naráža na potenciálový val, ktorý ju obklopuje. Pri každom náraze existuje istá pravdepodobnosť, že ho pretuneluje (2.46). Rozpadová konštanta  $\lambda$  bude zrejme daná súčinom troch členov:

$$\lambda = \lambda_0 v T \tag{2.51}$$

kde  $\lambda_0$  –pravdepodobnosť kreovania častice  $\alpha$  v jadre,  $v$  – počtom nárazov za jednotku času na potenciálovú bariéru a  $T$  – pravdepodobnosť prechodu častice valom. Ak alfa častica kmitá v jadre s polomerom  $R_0$  rýchlosťou  $v$ , potom

$$v = \frac{v}{2R}$$

Pre typické hodnoty rýchlosti  $v \approx 2 \cdot 10^7 \text{ms}^{-1}$  a  $R_0 \approx 10^{-14} \text{m}$  je frekvencia nárazov obrovská  $v \approx 10^{21} \text{s}$ . Napriek tomuto treba pri niektorých jadrách čakať na emisiu alfa častíc desiatky rokov (viď tab.).

Koeficient priepustnosti  $T$  vypočítame podľa vzťahu (2.46) s potenciálnou energiou (2.50). Hranice bariéry sú určené polomerom jadra  $R_0$  a vzdialenosťou  $R$  od jeho stredu, v ktorej je splnená podmienka  $U = E$ :

$$x_1 = R_0 \approx 1,2 \cdot 10^{-13} \text{ A}^{1/3} \text{ cm} \quad (2.52)$$

$$x_2 = R = \frac{2e^2 Z}{4\pi\epsilon_0 E} \quad (2.53)$$

$A$  je nukleové číslo,  $Z$  je protónové číslo dcérskeho jadra,  $2e$  náboj alfa častice. Pre stredne ťažké jadro  $^{226}\text{Ra}$ , ktoré emituje alfa častice s energiou  $E = 4,78 \text{ MeV}$ , dostaneme  $x_1 \approx 7,3 \text{ fm}$ ,  $x_2 \approx 50 \text{ fm}$ .

$$\ln T \approx -2 \int_{R_0}^R dx \sqrt{\frac{2m_\alpha \left( \frac{2e^2 Z}{4\pi\epsilon_0 r} - E \right)}{\hbar^2}} = -2 \int_{R_0}^R dx \sqrt{\frac{2m_\alpha}{\hbar^2} \left( \frac{2e^2 Z}{4\pi\epsilon_0 r} - E \right)} \quad (2.54)$$

Jednoduchou úpravou

$$\ln T = -2 \int_{R_0/R}^1 dx \sqrt{\frac{2m_\alpha E}{\hbar^2} \sqrt{\left( \frac{R}{x} - 1 \right)}} \quad (2.55)$$

Zavedíme substitúciu  $x = R \cos^2 \varphi$

$$\ln T = -2 \sqrt{\left( \frac{2m_\alpha E}{\hbar^2} \right)} R \left[ \arccos \sqrt{\frac{R_0}{R}} - \sqrt{\frac{R_0}{R} \left( 1 - \frac{R_0}{R} \right)} \right] \quad (2.56)$$

Pre široké bariéry  $R \gg R_0$  podľa Taylorového rozvoja platí

$$\arccos \sqrt{\frac{R_0}{R}} \approx \frac{1}{2} \pi - \sqrt{\frac{R_0}{R}} \quad (2.57)$$

$$\sqrt{1 - \frac{R_0}{R}} \approx 1 \quad (2.58)$$

Dosadením do (2.56)

$$\ln T = -2 \sqrt{\left( \frac{2m_\alpha E}{\hbar^2} \right)} R \left[ \frac{1}{2} \pi - 2 \sqrt{\frac{R_0}{R}} \right] \quad (2.59)$$

Nahradíme veličinu  $R$  výrazom  $R = \frac{2e^2 Z}{4\pi\epsilon_0 E}$ :

$$\ln T = \frac{4e}{\hbar} \sqrt{\frac{m_\alpha}{4\pi\epsilon_0}} Z^{1/2} R_0^{1/2} - \frac{e^2}{\hbar\epsilon_0} \sqrt{\frac{1}{2} m_\alpha Z E^{-1/2}} \quad (2.60)$$

a po dosadení konštánt

$$\ln T = 2,97 Z^{1/2} R_0^{1/2} - 3,95 Z E^{-1/2}$$

kde  $E$  je kinetická energia častice  $\alpha$  vyjadrená v MeV,  $R_0$  - polomer jadra vyjadrený v fermiónoch. Rozpadová konštanta  $\lambda$  podľa (2.51)

$$\ln \lambda = \ln \lambda_0 + \ln \frac{v}{2R_0} + 2,97 Z^{1/2} R_0^{1/2} - 3,95 Z E^{-1/2} \quad (2.61)$$

kde  $v = \sqrt{\frac{2E}{m_\alpha}}$

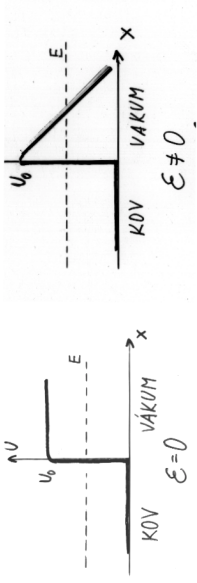
Dominantným faktorom, ktorý určuje rád  $\ln \lambda$ , je tretí člen. Ak predpokladáme, že  $\alpha$  alfa častice majú energiu od 4 do 9 MeV, prvý člen rovnice (2.61) sa mení v tomto energetickom intervale o  $\ln \frac{3}{2}$ , druhý člen o  $148 * \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{3} \right) \approx 25$ . Hodnota  $\lambda_0$  reprezentuje pravdepodobnosť vytvorenia častice vo vnútri jadra. Jej príspevok významne závisí od konfigurácie nukleónov v jadre a môže byť určený len veľmi približne modelovými výpočtami. Našťastie celý člen  $\lambda_0$  je argumentom logaritmu, jeho nepresnosť nezohráva takmer žiadnu úlohu.

Kvantovo mechanický rozbor vyžarovanie alfa častíc umožňuje pochopiť závislosť polčasu rozpadu na energii. Ďalším významným prínosom teórie alfa rozpadu je experimentálne potvrdenie prenikania častíc potenciálnym valom s väčšou potenciálnou energiou, ako má alfa častica. V klasickej fyzike k takémuto javu nemôže dôjsť. Z rovnice (2.61) možno tiež určiť polomer jadra, ktorý zodpovedá hodnote získanej jadrovým rozptylom Rutherfordového typu.

Vzťah (2.61) popisuje aj obrátený proces, keď nabitá častica s energiou  $E$ , menšou ako výška coulombovskej bariéry  $U$ , naráža na jadro. Prekonaním coulombovskej bariéry, prebehne jadrová reakcia, ktorej pravdepodobnosť  $T$  rastie zvyšovaním energie  $E$ . Nabité častice sa preto urýchľujú urýchľovačmi. Situácia sa zmení, keď iniciátormi jadrovej reakcie budú neutróny. Neutrálne častice nemusia prekonať coulombovskú bariéru a preto voľne prenikajú do jadra. Použitím tepelných neutrónov s  $E \sim \frac{1}{40} \text{ eV}$  sú výťažky mnohých jadrových reakcií pomerne vysoké.

## Studená emisía elektrónov

Ďalším ilustračným príkladom tunelovania častíc je studená emisía elektrónov. Vo vnútri kovu sa pohybujú voľné elektróny, sprostredkujúce vodivosť. Na opustenie kovu potrebujú dodatočnú energiu  $\varphi = U_0 - E \approx 5$  až  $10 \text{ eV}$ , ktorá sa nazýva výstupnou prácou. Vložíme kov do vonkajšieho elektrického poľa s intenzitou  $\varepsilon$ . Potenciálna energia častíc vzrastie o  $-e\varepsilon x$  a výsledný priebeh sa zmení:



Vzniknutým potenciálovým val môže elektrón pretunelovať, podobne ako alfa častica Coulombovskú bariéru. Tento proces sa nazýva *chladnou emisíou*. Priebeh potenciálnej energie nahradíme priamkou

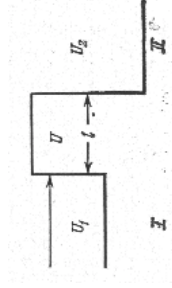
$$U(x) - E = \varphi - e\epsilon x$$

a dosadíme do (2.46)

$$T \approx \exp \left[ -\frac{2a}{\hbar_0} \int \sqrt{2m(\varphi - e\epsilon x)} dx \right] = \exp \left[ -\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m}}{\hbar e \epsilon} \varphi^{\frac{3}{2}} \right] \quad (2.62)$$

Priaznačnosť kovu rastie so zväčšovaním intenzity elektrického poľa a so zmenšovaním výstupnej práce. Napriek tomu experimentálne merané toky elektrónov sú niekoľkonásobne vyššie ako predpokladá teória. Je to spôsobené tým, že povrch kovov nie je dokonale hladký, obsahuje mikroskopické nerovnosti vytvárajúce silné nehomogénne polia, niekoľkonásobne odlišné od  $\epsilon$ . (podľa Coulombovej vety je intenzita elektrického poľa nepriamo úmerná polomeru krivosti). Veľká citlivosť koeficientu  $T$  na zvýšenie intenzity poľa  $\epsilon$  má preto za následok jeho vzrast.

**[2.3\*]** a) Vypočítajte koeficient priprustnosti  $T$  a odraznosti pre bariéru zobrazenú na obr. b) Vyšetrite situáciu  $U_1 = U_2$ . c) Za akých podmienok sa nebude častica od bariéry vôbec odrážať?



**[2.4\*]** Vypočítajte pravdepodobnosť termojadrovej reakcie pri izbovej teplote a pri teplote Slnka.

## 2.3 Potenciálové jamy

### 2.3.1 Nekonečná jama

Výšetrujme pohyb častice s hmotnosťou  $m$ , ktorá je viazaná na konečný interval  $0 \leq x \leq l$ . Aby sme zabránili jej prenikaniu mimo túto oblasť, obklopiť ju potenciálnou stenou s  $U(x) \rightarrow \infty$ . Formálne možno povedať, že častica sa pohybuje v poli s potenciálnou energiou:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq l \\ \infty & x < 0, x > l \end{cases}$$

Schr pre stacionárne stavy

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0 \quad (2.63)$$

má riešenie

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad (2.64)$$

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \quad (2.65)$$

Pravdepodobnosť výskytu častice mimo oblasti  $(0, l)$  je nulová a preto  $\Psi(x) = 0$ . Vlnová funkcia musí byť spojitá a preto  $\psi(0) = \psi(l) = 0$ . Dosadením do týchto okrajových podmienok dostaneme sústavu dvoch rovníc:

$$B \cos kl = 0 \quad (2.66)$$

$$A \cos kl - B \sin kl = 0 \quad (2.67)$$

z ktorých vyplýva:

$$A \sin kl = 0 \quad (2.68)$$

Rovnica (2.68) je splnená pre všetky vlnové vektory  $k_n$ :

$$k_n l = n\pi, \quad n \in Z_{\{0\}} \quad (2.69)$$

Prípád  $n = 0$ , pretože vedie k triviálnemu výsledku  $\psi \equiv 0$ , ktorý je fyzikálne neakceptovateľný, pretože častica by sa nikdy nevyskytovala. Záporné hodnoty  $n$  menia znamienko vlastnej funkcie, ale nevedú k novým fyzikálnym stavom  $\psi(n)\psi^*(n) = \psi(-n)\psi^*(-n)$ . Stačí preto vyberať kvantové čísla  $n$  z množiny prirodzených čísel. Energiu častíc získame dosadením (2.69) do (2.65):

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2 \quad (2.70)$$

kde  $n = 1, 2, 3, \dots$  so zodpovedajúcimi vlastnými funkciami:

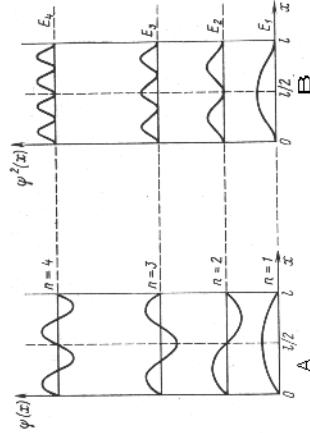
$$\psi_n(x) = A \sin \frac{\pi n}{l} x \quad (2.71)$$

Konštantu  $A$  určíme z normovacej podmienky:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \psi_n^* dx = A^2 \int_0^l \sin^2 \frac{\pi n}{l} x dx = 1$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{l}}$$

Na obrázku sú graficky znázornené funkcie  $\psi_n$  spolu s hustotou pravdepodobnosti  $\frac{dP}{dx} = \psi_n \psi_n^*$ .



V intervale  $0 \leq x \leq l$  obsahujú  $(n-1)$  uzlov, v ktorých sa častica nevyskytuje vôbec a  $n$  extrémov, kde ju možno objaviť s najväčšou pravdepodobnosťou. Častice v stave  $n=1$  sa prednostne nachádzajú v strede jamy pričom vo všetkých kvantových stavoch nedosiahnu jej okraj  $\psi(0) = \psi(l) = 0$ . S rastom kvantového čísla  $n$  sa maximálna hustota pravdepodobnosti  $\psi_n \psi_n^*$  navzájom približujú. Pri veľkých hodnotách  $n$  sa striedajú s minimami tak rýchlo, že sa zlievajú a vytvárajú rovnomerné rozdelenie, typické pre klasické častice  $dP_{kl} = \frac{dx}{l} = \text{konšt.}$

Energetické spektrum je diskrétné s minimálnou hodnotou energie:

$$E_{\min} = E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} \quad (2.72)$$

na rozdiel od klasickej fyziky, kde  $E_{\min} = 0$ . Relatívny rozstup energetických hladín sa so zväčšujúcim kvantovým číslom  $n$  znižuje a pri veľkých hodnotách  $n$  je takmer nepozorovateľný. Spektrum sa stáva spojitým ako v prípade klasických častíc ( $n \gg 1$ ):

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} (2n+1)}{\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2} \approx \frac{2}{n} \rightarrow 0$$

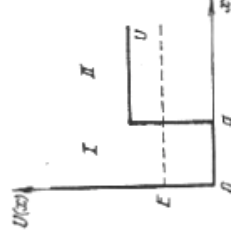
Uvedený trend je plne v súlade s optickou analógiou a s princípom korešpondencie: Nárastom kvantového čísla (2.72) sa zväčšuje energia  $E_n$  a znižuje de Broglieho vlnová dĺžka:

$$\lambda_n = \frac{h}{\sqrt{2mE_n}} \sim \frac{1}{n} \rightarrow 0$$

Tým sa však spĺňajú podmienky pre platnosť klasickej fyziky  $l \gg \lambda$ .

### 2.3.2 Jednorozmerná polonekonečná jama.

Predpokladajme, že častica je viazaná v nasledujúcom silovom poli



čiže

$$U = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 < x < a \\ U & x > a \end{cases}$$

a jej energia  $E < U$ . Nájďme energiu viazaných stavov. Podľa klasickej fyziky jej kinetická energia sa nemení a môže nadobúdať ľubovoľné hodnoty. Častica nemá dostatok energie na opustenie jamy a periodicky sa odráža od stien. V celej oblasti  $0 \leq x \leq a$  sa vyskytuje s rovnakou pravdepodobnosťou.

V kvantovej mechanike bude jej chovanie odlišné. Pri náraze na pravú stenu jamy  $|\psi(a)|^2 \neq 0$ . Zo spojitosti  $\psi$  vyplýva, že jej hodnota nemôže klesnúť okamžite na nulu a preto častica presakuje aj do „zakázanéj“ zóny II. Hustota pravdepodobnosti zrejme exponenciálne klesá ako v prípade schodu.

Rozdelíme  $x$ -ovú os na oblasti s konštantnou hodnotou potenciálu. Oblasť  $x < 0$  je neprístupná aj pre kvantovú časticu a  $\psi_0(x) = 0$ .

V oblasti I má Schr tvar

$$\frac{d^2 \psi_I(x)}{dx^2} + k_1^2 \psi_I(x) = 0$$

a riešenie

$$\psi_1 = A \sin k_1 x + B \cos k_1 x$$

V oblasti II

$$\frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} + k_2^2\psi_{II}(x) = 0$$

a jej riešenie

$$\psi_{II}(x) = Be^{k_2x} + Ce^{-k_2x}$$

kde pre vlnové vektory:  $k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$ ,  $k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}[E - U]$ .

Vlnová funkcia  $\psi_{II}(x)$  musí byť normovateľná, čo možno zabezpečiť vhodným výberom konštanty  $B = 0$ , a tak odstrániť divergentný člen  $e^{k_2x}$  pre  $x \rightarrow \infty$ .

Vlastná funkcia  $\psi(x)$  spolu s deriváciou je spojitá v bode  $x = a$ . V bode  $x = 0$  je spojitá iba vlastná funkcia, bez svojej derivácie, pretože potenciálna energia je tu neohraničená ( $U \rightarrow \infty$ ):

$$\psi_0(0) = \psi_1(0) \Rightarrow 0 = B \Rightarrow \psi_1 = A \sin k_1x \quad (2.73)$$

$$\psi_1(a) = \psi_{II}(a) \Rightarrow A \sin k_1a = Ce^{-k_2a} \quad (2.74)$$

$$\left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_{x=a} = \left. \frac{d\psi_{II}}{dx} \right|_{x=a} \Rightarrow Ak_1 \cos k_1a = -k_2Ce^{-k_2a} \quad (2.75)$$

Predeľme (2.74) rovnicou (2.75):

$$\frac{1}{k_1} \operatorname{tg}(k_1a) = -\frac{1}{k_2} \quad (2.76)$$

Jedinou neznámou v (2.76) je energia sústavy  $E$ . Rovnica sa nedá riešiť analyticky, iba numericky, resp. graficky. Napriek tomu sa pokúsime získať niektoré informácie o systéme. Pravá strana (2.76) je záporná ( $k_2 > 0$ ) a argumenty tangensu musia ležať v týchto intervaloch :

$$\frac{\pi}{2} < k_1a < \pi \quad \frac{3\pi}{2} < k_1a < 2\pi \dots$$

Veličina  $k_1a$  je vo všetkých prípadoch zdola ohraničená:

$$k_1a > \frac{\pi}{2} \quad (2.77)$$

Umocnime nerovnosť (2.77) a dosadíme za  $k_1$ :

$$\frac{2mE}{\hbar^2}a^2 > \frac{\pi^2}{4} \Rightarrow E > \frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2} \quad (2.78)$$

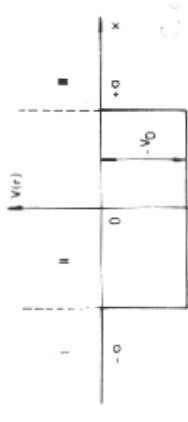
Pre viazané stavy  $E < U$ :

$$Ua^2 > \frac{\pi^2\hbar^2}{8m} \quad (2.79)$$

Na ľavej strane sú parametre jamy, na pravej univerzálna konštanta. Rovnica reprezentuje nutnú podmienku na vytvorenie viazaných stavov. Ak je jama príliš úzka, resp. príliš nízka a súčin  $Ua^2 < \frac{\pi^2\hbar^2}{8m}$ , nevznikne ani jeden viazaný stav. S podobnými situáciami sa stretávame často. Potenciálna jama príťažlivých síl dvoch neutrónov je príliš plytká na vytvorenie viazaného stavu, a preto v prírode nenájdeme jadro zložené z dvoch neutrónov. Na druhej strane príťažlivé sily medzi neutrónom a protónom sú o niečo väčšie, ale už postačujú na vytvorenie práve jedného viazaného stavu, ktorý sa nazýva deuterón. Jama je však príliš plytká, aby mohol vzniknúť excitovaný stav.

### 2.3.3 Častica v potenciálnej jame konečnej hĺbky.

Hľadáme stacionárne stavy a energetické spektrum častice s hmotnosťou  $m$ , ktorá sa nachádza v jednorozmernej potenciálovej jame s hĺbkou  $U_0$  a šírkou  $2a$



Postup je identický ako v predchádzajúcich prípadoch, len s tým rozdielom, že pri zostávaní riešení v oboch bodoch  $x = a$ ,  $x = -a$  musíme zabezpečiť aj spojitost prvých derivácií  $\psi(x)$  (potenciál je ohraňovaný). Zavedme označenie:

$$k = \sqrt{2mE/\hbar^2}, \quad \alpha = \sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2} \quad (2.80)$$

Všetky pododmocninové výrazy sú kladné. SchR vo vnútri jamy  $|x| < a$  má tvar:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \alpha^2\psi = 0 \quad (2.81)$$

a mimo nej  $|x| > a$ :

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi = 0 \quad (2.82)$$

Riešenia týchto rovníc sú:

$$\psi_I = Ce^{-\alpha x} + C'e^{\alpha x} \quad (2.83)$$

$$\psi_{II} = A \cos kx + B \sin kx \quad (2.84)$$

$$\psi_{III} = De^{-\alpha x} + D'e^{\alpha x} \quad (2.85)$$

Normovateľnosť vlnovej funkcie v celom definičnom obore zabezpečíme odstránenie divergentných členov (ak  $x \rightarrow \infty$ ,  $\psi_{III}(x) \rightarrow \infty$ , pretože  $e^{\alpha x} \rightarrow \infty$ , podobne  $x \rightarrow -\infty$ ,  $\psi_I(x) \rightarrow -\infty$ , pretože  $e^{-\alpha x} \rightarrow \infty$ ) nasledovnou voľbou konštánt:  $D' = 0$  a  $C' = 0$ .

Z podmienok spojitosti vlnovej funkcie  $\psi(x)$  a jej derivácií  $\frac{d\psi(x)}{dx}$  v bodoch  $x = -a$  a  $x = a$  možno odvodiť ďalšie podmienky :

$$\psi_I(-a) = \psi_{II}(-a) \Rightarrow A \cos ka + B \sin ka = C e^{-\alpha a} \quad (2.86)$$

$$\left. \frac{d\psi_I(x)}{dx} \right|_{x=-a} = \left. \frac{d\psi_{II}(x)}{dx} \right|_{x=-a} \Rightarrow -kA \sin ka + kB \cos ka = -\alpha C e^{-\alpha a} \quad (2.87)$$

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \Rightarrow A \cos ka - B \sin ka = D e^{-\alpha a} \quad (2.88)$$

$$\left. \frac{d\psi_{II}(x)}{dx} \right|_{x=a} = \left. \frac{d\psi_{III}(x)}{dx} \right|_{x=a} \Rightarrow -kA \sin ka - kB \cos ka = -\alpha D e^{-\alpha a} \quad (2.89)$$

Vzájomným sčítaním a odčítaním rovníc dostaneme:

$$A \cos ka = (C + D) e^{-\alpha a} \quad 2kA \sin ka = \alpha (C + D) e^{-\alpha a} \quad (2.90)$$

$$2B \sin ka = (C - D) e^{-\alpha a} \quad 2kB \cos ka = -\alpha (C - D) e^{-\alpha a} \quad (2.91)$$

Zo symetrie úlohy vyplýva, že častica sa s rovnakou pravdepodobnosťou vyskytuje v pravej a ľavej časti jamy, a preto hustota pravdepodobnosti  $|\psi(x)|^2$  je symetrická funkcia:

$$|\psi_I(x)|^2 = |\psi_{III}(x)|^2 \Rightarrow C^2 = D^2 \Rightarrow C = \pm D \quad (2.92)$$

Existujú teda dva typy riešení so symetrickou a antisymetrickou  $\psi(x)$ , ktoré osobitne vyšetříme:

1,  $C = D$  a  $A \neq 0$  sú rovnice (2.91) splnené identicky a rovnice (2.90) možno splniť len vtedy, keď platí:

$$k \operatorname{tg} ka = \alpha \quad (2.93)$$

2,  $C = -D$  a  $B \neq 0$  rovnice (2.90) sú splnené identicky a rovnice (2.91) možno splniť len vtedy, keď:

$$k \operatorname{ctg} ka = -\alpha \quad (2.94)$$

Ide o transcendentné rovnice, ktoré sa riešia numericky. Pre väčšiu názornosť si ukážeme grafickú metódu. Zavedieme bezrozmerné veličiny :

$$\xi = ak \quad \text{a} \quad \eta = \alpha a \quad (2.95)$$

a pretransformujeme rovnice (2.93) a (2.94). Pre párne funkcie:

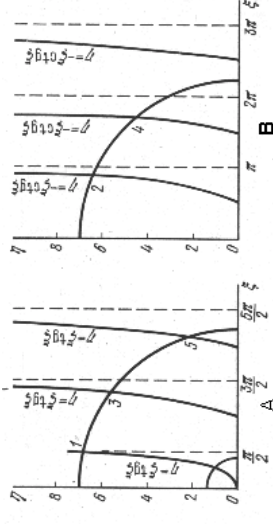
$$\eta = \xi \operatorname{tg} \xi \quad (2.96)$$

pre nepárne

$$\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi \quad (2.97)$$

Zo vzťahov pre  $k$  a  $\alpha$  (2.80) ďalej vyplýva:

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2} = R^2 \quad (2.98)$$



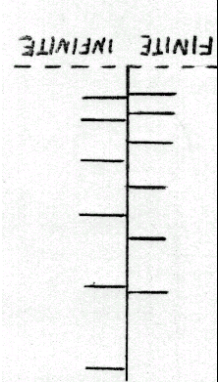
Na obrázkoch sú zobrazené krivky  $\eta = \xi \operatorname{tg} \xi$  ( $\eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi$ ) v prvom kvadrante, pretože parametre  $\eta > 0$  a  $\xi > 0$ . Vertikálne čiary zobrazujú ich asymptoty. Krivku sú pretnuté kružnicami s polomerom  $R = \sqrt{\frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2}}$  určenými vlastnosťami potenciálnej bariéry ( $U_0, a$ ). Každému priesečníku ( $\eta, \xi$ ) kružnice so sústavou kriviek zodpovedá riešenie Schr. Pre jamu s konečnou hĺbkou existuje konečný počet priesečníkov, a teda aj viazaných stavov. Ich počet s hĺbkou narastá. Napríklad, ak je polomer kružnice  $R = 7$ , získame 5 riešení (obr). Priesečníky 1, 3, 5 zodpovedajú párnym a priesečníky 2, 4 nepárnym vlnovým funkciám. Ak však parametre bariéry spĺňajú vzťah:

$$0 \leq U_0 a^2 \leq \frac{\hbar^2 \pi^2}{8m} \quad (2.99)$$

existuje iba jeden viazaný stav reprezentovaný párnou vlnovou funkciou. Na rozdiel od polonekonečnej bariéry viazaný stav vzniká vždy, dokonca aj na veľmi plytkej a krátkej jame. S rastom potenciálnej energie a hĺbky narastá polomer  $R$  a počet priesečníkov na grafe. Diskrétnym hodnotám  $\eta$  odpovedajú podľa (2.96) diskkrétne hodnoty energie  $E_n$

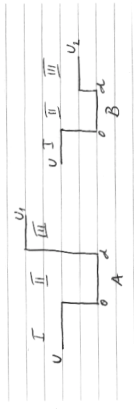
$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \eta^2 \quad (2.100)$$

Energie viazaných stavov pre konečnú bariéru sú menšie ako pre nekonečnú. Dôvod je jednoduchý. De Broglieho vlna v konečnej jame „presakuje“ aj do zakázaných zón ( $E < U$ ), čo spôsobuje zväčšenie jej vlnovej dĺžky v porovnaní s nekonečnou bariérou. Podľa Bohrovho vzťahu  $\lambda = \frac{h}{p}$  klesá hĺbkosť a následne aj energia. Pre ilustráciu porovnanáme energetické hladiny v jednotkách  $\frac{\hbar^2}{ma^2}$



### 2.3.4 Nesymetrické konečné jamy-kvalitatívne.

Majme dve jamy s rovnakou šírkou  $d$  a rôznymi potenciálnymi energiami ( $U_1$  a  $U_2$ ) v oblasti  $x > d$



Riešenie SchR v oblasti II:

$$\psi_{II} = B \cos(kx + \Delta) \quad (2.101)$$

sa spája v bodoch  $x = \pm a$  s exponenciálami nasledovného tvaru:

$$\psi_I = A \exp(\alpha_0 x) \quad (2.102)$$

$$\psi_{IIIi} = C \exp(-\alpha_i x) \quad (2.103)$$

kde

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} \quad \alpha_0 = \sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2} \quad \alpha_i = \sqrt{2m(U_i - E)/\hbar^2}$$

Z podmienok spojitosti ďalej vyplýva:

$$\alpha_i = k \operatorname{tg}[ka + \Delta] \quad (2.104)$$

Vypočítajme relatívne krivosti vlnových funkcií v bodoch  $x = \pm a$ :

$$\left| \frac{1}{\psi_I} \frac{d\psi_I}{dx} \right|_{x=-a} = \alpha_0 \quad (2.105)$$

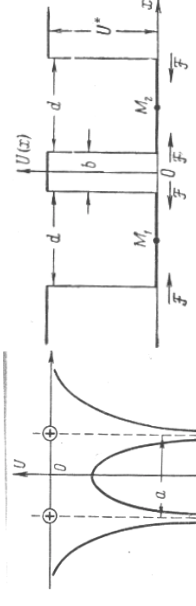
$$\left| \frac{1}{\psi_{IIIi}} \frac{d\psi_{IIIi}}{dx} \right|_{x=a} = \alpha_i \quad (2.106)$$

Mierou zakrivenia sú priamo parametre  $\alpha_0, \alpha_i$ , pričom  $\alpha_2 < \alpha_1$ . Zväčšovaním zakrivenia ( $\alpha$ ) rastie podľa rovnice (2.104) parameter  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda}$  a klesá de Broglieho vlnová dĺžka  $\lambda$ . Dôsledkom prudšieho zakrivenia kosínusovej funkcie v jame a, zrejme platí:

$$\lambda_2 > \lambda_1 \Rightarrow E_1 > E_2$$

### 2.3.5 Dve pravouhlé potenciálne jamy

Výšetrimo pohyb elektrónu v dvojrozmerných molekulách, napr. vo vodíku  $H_2$ . Častica je priťahovaná coulombovskou interakciou k obojm jadrom, ktoré sa nachádzajú v istej vzdialenosti. Nahradíme priebeh potenciálnej energie (na obr. vľavo) jednorozmerným modelom poľa na obr. vpravo



Sily pôsobiace na hranici ľavej potenciálnej jamy udržiavajú elektrón v okolí bodu  $M_1$  a sily na hranici pravej jamy - okolo bodu  $M_2$ . Elektrón, podobne ako v reálnej situácii, bude rozmazaný v celom priestore. Predpokladáme že  $E < U$ . Riešenie SchR po vylúčení divergentných členov, má nasledovný tvar:

$$\psi = \begin{cases} C e^{\beta x} \\ D e^{-\beta x} \\ A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} x + \varphi_1\right) \\ B \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} x + \varphi_2\right) \\ G e^{\beta x} + F e^{-\beta x} \end{cases} \quad \begin{aligned} x &\leq -\left(d + \frac{b}{2}\right) \\ x &\leq +\left(d + \frac{b}{2}\right) \\ -\left(d + \frac{b}{2}\right) &\leq x \leq -\frac{b}{2} \\ \frac{b}{2} &\leq x \leq +\left(d + \frac{b}{2}\right) \\ -\frac{b}{2} &\leq x \leq \frac{b}{2} \end{aligned}$$

kde  $\beta = \frac{2\pi}{\hbar} \sqrt{2m(U - E)}$  a  $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$

Potenciál je symetrický vzhľadom na bod  $x = 0$ , a preto hustota pravdepodobnosti výskytu častice  $w$  sa pri zámene  $x \leftrightarrow -x$  zachováva:

$$\psi(x) \psi^*(x) = \psi(-x) \psi^*(-x) \Rightarrow \psi(x) = \pm \psi(-x)$$

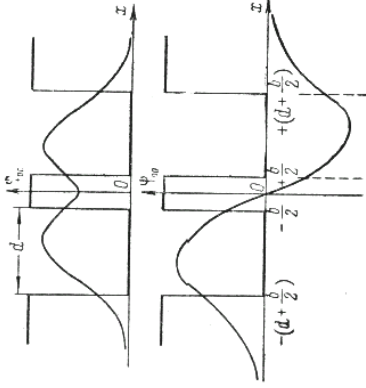
Správanie vlnovej funkcie je určené najmä jej štruktúrou v oblasti obklopujúcej začiatok. V tejto časti je riešenie SchR lineárnou kombináciou reálnych exponenciál, ktoré vzhľadom na symetriu problému musia byť buď symetrické:

$$\psi_s = F(e^{\beta x} + e^{-\beta x}) \quad (2.107)$$

alebo asymetrické:

$$\psi_a = F(e^{\beta x} - e^{-\beta x}) \quad (2.108)$$

Vlnové funkcie v jednotlivých jamách pre ten istý kvantový stav  $n$  môžu byť vzájomne spojené symetricky alebo nesymetricky, čo vedie k štiepeniu hladín. Na obrázku je znázornený ich priebeh pre základný stav  $n = 1$ .



Veľkosti energií porovnáme metódou „relatívnych krivostí“, s ktorou sme sa zoznámili v predchádzajúcej kapitole. Pre vnútorné hranice jám (napravo od bodu  $x = d + \frac{b}{2}$  a naľavo od bodu  $x = \frac{b}{2}$ ) platí:

$$\left| \frac{1}{\psi} \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=d+\frac{b}{2}} = -\beta \quad (2.109)$$

$$\left| \frac{1}{\psi} \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=\frac{b}{2}} = -\beta \frac{1 \mp e^{\beta b}}{1 \pm e^{-\beta b}} \quad (2.110)$$

Horné znamienko zodpovedá symetrickej a dolné antisymetrickej vlnovej funkcie. Pre symetrické riešenie:

$$\left| \frac{1}{\psi_s} \frac{d\psi_s}{dx} \right|_{x=\frac{b}{2}} < \left| \frac{1}{\psi_s} \frac{d\psi_s}{dx} \right|_{x=d+\frac{b}{2}} = \beta \quad (2.111)$$

funkcia  $\psi_s$  vstupuje z oblasti  $x > (d + \frac{b}{2})$  do jamy ostrejšie, ako do vnútornej hranice  $x < \frac{b}{2}$ . V prípade antisymetrického riešenia je to opačne:

$$\left| \frac{1}{\psi_a} \frac{d\psi_a}{dx} \right|_{x=\frac{b}{2}} > \left| \frac{1}{\psi_a} \frac{d\psi_a}{dx} \right|_{x=d+\frac{b}{2}} = \beta \quad (2.112)$$

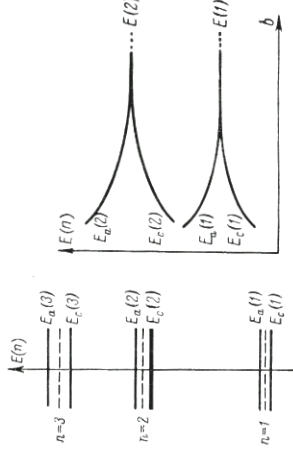
a teda:

$$\left| \frac{1}{\psi_a} \frac{d\psi_a}{dx} \right|_{x=\frac{b}{2}} > \beta > \left| \frac{1}{\psi_s} \frac{d\psi_s}{dx} \right|_{x=\frac{b}{2}} \quad (2.113)$$

S takouto situáciou sme sa stretli pri nesymetrických jamách. Podľa (\*\*\*) stredné krivosti izolovanej jamy v bode  $x = \frac{b}{2}$  sú väčšie ako pre symetrické riešenia, ale menšie ako pre antisymetrické. Rovnaké porovnanie platí aj pre kinetické energie:

$$\lambda_s > \lambda > \lambda_a \Rightarrow E_s < E < E_a \quad (2.114)$$

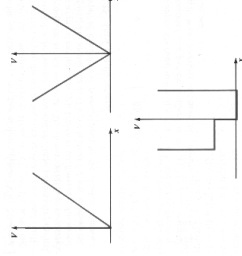
Energetická hladina izolovanej jamy  $E(n)$  sa v sústave dvoch jam štiepia na dve rôzne hladiny  $E_s < E_a$ .



V limitnom prípade, keď  $b \rightarrow 0$ , stena vynizne, vlastné funkcie a spektrá budú rovnaké ako pre jedinú jamu s dvojnásobnou šírkou. Symetrické riešenia s kvantovým číslom  $n = 1$  prechádzajú na riešenie  $n_s = 1$  a antisymetrické na  $n_a = 2$ . Porovnaním vlnových funkcií dvoch jam s vlastnými funkciami jednej jamy pozorujeme, že v zodpovedajúcich oblastiach sa navzájom veľmi podobajú. Symetrická vlnová funkcia dvojitej jamy je hladkým symetrickým spojením dvoch vlnových funkcií oddelených jam. Antisymetrická je zase antisymetrickým spojením. V prípade potenciálu zloženého s periodického opakovania  $N$  susedných jam, sa každý stav štiepi na  $N$  stavov s rôznymi energiami. Ich energetický rozostup sa znižuje s narastaním počtu jam. Štiepenie kvantových stavov je typické aj pre viacrozmerné jamy ľubovoľného tvaru. Môžeme sa s nimi stretnúť v kryštáloch.

**[2.5\*]** Častica sa nachádza v nekonečnej jame so šírkou  $a$ . S akou pravdepodobnosťou nájdeme časticu v oblasti  $1/4a \leq x \leq 3/4a$  v kvantovom stave  $n = 4$ ? Určte jej energiu a vlnovú funkciu.

**[2.6\*]** Na obrázku sú znázornené tri rôzne jamy. Nájdite energiu a vlnovú funkciu základného, prvého a druhého excitovaného stavu v jednorozmernom prípade. Vlnové funkcie znázornite a identifikujte miesta, v ktorých  $\psi = 0$ ,  $\frac{d\psi}{dx} = 0$  a  $\frac{d^2\psi}{dx^2} = 0$

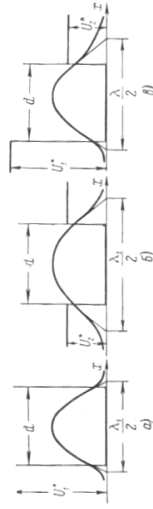


**[2.7\*]** Elektron sa nachádza v jame s potenciálovou bariérou 6,0 eV. Určte šírku bariéry, ak energia základného stavu je 0,4 eV.

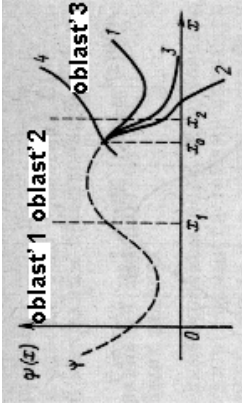
[2.8.] Vytvorte si model jadra (jeho parametre navrhňte) a odhadnite väzbovú energiu deuteronu. Porovnajte ju s experimentálnou hodnotou 2,21 MeV.

[2.9.] Určte pomer medzi hustotami pravdepodobnosti, že sa elektrón bude nachádzať na prvej a druhej energetickej hladine v intervale  $\frac{L}{4}$  rovnako vzdialeného od stien potenciálovej krabice so šírkou  $L$ .

[2.10.] Na obrázku sú znázornené symetrické a nesymetrické jamy. Kvalitatívnou analýzou nájdite vzťah medzi:  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda$ .



Rovnica (3.1) hovorí, že v každom bode  $x$  je druhá derivácia  $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$  úmerná  $\psi(x)$  s koeficientom úmernosti  $U(x) - E$ . Ak  $U(x) - E \geq 0$ , rýchlosť zmeny smernice bude mať rovnaké znamienko ako  $\psi(x)$ . Znamená to, že funkcia  $\psi(x)$  bude vypuklá smerom k osi  $x$  a bude sa podobáť na niektorú z kriviek nakreslených na obr. Krivky majú tendenciu vzdďalovať sa od osi  $x$  okrem špeciálneho prípadu, kedy sa k nej asymptoticky približujú. Ak  $U(x) - E \leq 0$ , druhá derivácia  $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$  bude mať opačné znamienko ako samotná funkcia  $\psi(x)$  a krivka  $\psi(x)$  sa bude zakrivovať smerom k osi  $x$ . Riešenia v tejto časti majú oscilačný charakter,  $\psi(x)$  sa neustále vracia k osi  $x$ . Pokúsme sa graficky skonstruovať riešenie (3.1) pre potenciál na obrázku



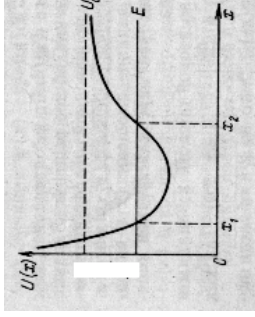
Rovnica (3.1) je lineárnou diferenciálnou rovnicou. Určením počiatkových podmienok ( $\psi(x_0), \frac{d\psi}{dx}(x_0)$ ) je jednoznačne daný jej priebeh. Situácia je analogická s mechanikou, kde sme z Newtonovho zákona ( $\frac{d^2x}{dt^2} = -kx$ ) a z počiatkových podmienok (polohy a rýchlosti) jednoznačne predikovali ďalší časový vývoj teles. Vyberme napríklad v oblasti II bod  $x_0$  a skúsime priebeh funkcie  $\psi$  pre rôzne počiatkové hodnoty  $\frac{d\psi}{dx}(x_0)$ . Krivka 1 ostáva zahnutá smerom nahor, pokiaľ nepretne hraničnú oblasť. V ďalšej časti sa zmení znamienko druhej derivácie  $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$  ( $U(x) - E \geq 0 \mapsto U(x) - E < 0$ ) a krivka začne neobmedzene rásť. Krivka 2 reprezentuje priebeh vlnovej funkcie pri inom výbere počiatkových podmienok. Hodnota  $\psi(x_0)$  sa zachováva ako pri krivke 1, ale hodnota  $\frac{d\psi}{dx}$  sa zmenšila. Priebeh vyzerá na začiatku veľmi nádejne, no nakoniec po prechode do zápornej oblasti neobmedzene narastá a opäť sa naruší normovanosť vlnovej funkcie. Jediný rozdiel je v tom, že rastúcou hodnotou  $x$  nadobúda  $\psi(x)$  stále väčšie a väčšie záporné hodnoty. Krivka 3 reprezentuje fyzikálne akceptovateľný výber  $\frac{d\psi}{dx}$  v bode  $x_0$ . V oblasti III je sice ohnutá smerom nahor, ale v celom intervale ostáva nad osou  $x$  a  $\psi(\infty) \rightarrow 0$ . Ako bude vyzeráť funkcia v oblastiach  $x \leq x_0$ ? Vo všeobecnosti očakávame, že jej hodnoty pre  $x \rightarrow -\infty$  neobmedzene narastajú, t.j.  $\psi(-\infty) \rightarrow \pm\infty$ . Nie je v našich silách zvrátiť tento negatívny trend výberom  $\frac{d\psi}{dx}$  v bode  $x_0$ , pretože by sme narušili správný (t.j. normovateľný) priebeh funkcie v oblasti  $x \rightarrow \infty$ . Pre danú energiu  $E$  teda neexistuje fyzikálne akceptovateľné riešenie. Zmenou celkovej energie  $E_0$  však dokážeme nájsť vhodnú vlnovú funkciu.

## Kapitola 3

### Približná metóda riešenia SchR

#### 3.1 Bohr-Sommerfeldova podmienka.

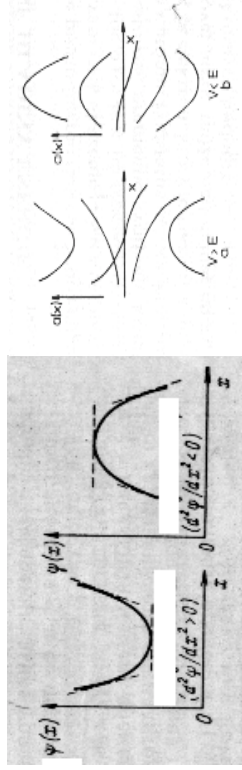
Predpokladajme, že potenciálna energia  $U(x)$  má nasledovný tvar

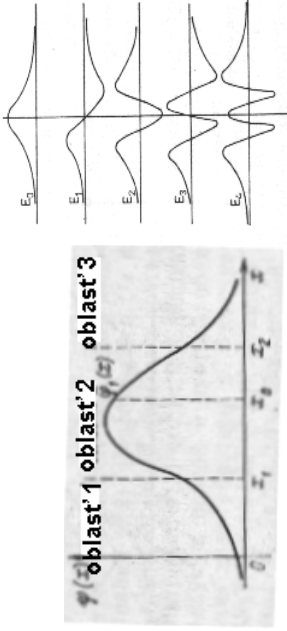


Výsetrime, ako sa bude správať systém, charakterizovaný vlnovou funkciou  $\psi$ , ktorá je riešením bezčasovej SchR.

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [U(x) - E] \psi(x) \quad (3.1)$$

Z matematickej analýzy vieme, že druhá derivácia ľubovoľnej funkcie predstavuje rýchlosť, s akou sa mení smernica dotyčnice ( $\tan \alpha$ ). Ak je táto zmena kladná,  $\tan \alpha$  rastie a funkcia sa zakrivuje od osi  $x$ , ak je zmena záporná,  $\tan \alpha$  klesá a funkcia sa zakrivuje opačne.





Znamená to, že častica môže mať len jedinú prípustnú energiu? Nie, možné sú aj iné energie, ale nie v blízkosti  $E_0$ . Aby vznikol nový viazaný stav, vlnová funkcia sa musí v oblasti jamy „pretočiť“, preťať  $x$ -ovú os a vstúpiť do oblasti I a III s vhodnou smernicou, ktorá zabezpečí jej asymptotický priebeh. Preto pretné  $x$ -ovú os na viacerých miestach. Počet extrémov (resp. nulových bodov) funkcie určuje „meno“ viazaného stavu, ktorému zodpovedá rôzna energia. Vo všeobecnosti vlnová funkcia  $n$ -tého stavu obsahuje  $n$  extrémov a  $n - 1$  nulových bodov. Pretransformujeme úlohu s časticou na prechod svetelnej vlny. Rozdelíme celú oblasť na úseky s hrúbkou  $dx$ , ktorým priradíme index lomu podľa rovnice (1.28). Vo vnútri jamy vznikajú de Broglieho stojaté vlny (podobne ako v optickom rezonátore):

$$\psi(x) = A(x) \sin \varphi(x) \quad (3.2)$$

kde  $A(x)$  je amplitúda,  $\varphi(x)$  fáza. Vlnová funkcia prechádza cez nulu, keď platí:  $\varphi(x) = n\pi$ . Každý novovzniknutý uzlový bod preto zvyšuje celkovú fázovú vlnu  $\Delta$  medzi  $x_1$  a  $x_2$  o  $\pi$ . Pri prechode z kvantového stavu  $n$  do  $n + 1$ , počet nulových bodov vzrastie o 1 a pre  $\Delta$  zrejme platí:

$$(n + 1)\pi \geq \Delta \geq n\pi \quad (3.3)$$

Zmena fázy vlny závisí od indexov lomu  $n$  t.j od energie  $E$  častíc a pre oblasť  $dx$  sa dá vypočítať podľa vzťahu:

$$\Delta = k dx = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} [E - V]} dx \quad (3.4)$$

Podobne pre celkovú zmenu fázy na intervale  $x_1, x_2$ :

$$\Delta = \int_{x_1}^{x_2} k dx = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} [E - V]} dx \quad (3.5)$$

Z rovnice (3.3) ďalej vyplýva:

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} [E - V]} dx = n\pi + J_0 \quad (3.6)$$

resp.

$$\oint \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} [E - V]} dx = 2n\pi + J_0 \quad (3.7)$$

kde  $J_0$  je konštanta nezávislá od  $n$ . Určuje sa porovnávaním vypočítaných hodnot energie s experimentom. V literatúre sa s (3.7) môžeme stretnúť v tvare

$$\oint p dx = nh + J_0 \quad (3.8)$$

kde  $p = \sqrt{2m [E - V]}$ .

Vráťme sa ešte na začiatok a skúsime prípad  $E \geq U_0$ . Os  $x$  rozdelíme na dve oblasti  $x \leq x_1$  a  $x \geq x_1$ . Vyberme bod  $x_0$  v druhej oblasti, kde  $U(x) - E \leq 0$  a preto pre  $\psi \geq 0$  sa krivka zakrivuje nahor, pre  $\psi \leq 0$  zase smerom nadol. Priebeh má oscilačný charakter a  $\psi$  sa neustále vracia k osi  $x$ . Funkcia je ohraničená pre ľubovoľný výbere  $\frac{d\psi}{dx}$  v bode  $x_0$ . V oblasti I môžeme preto vždy vybrať také riešenie, pri ktorom  $\psi(-\infty) \rightarrow 0$ , pretože bez ohľadu na hodnotu  $\frac{d\psi}{dx}$  v bode  $x_0$  bude funkcia  $\psi_{II}$  ohraničená. Schr má v tomto prípade spojité spektrum energií. Ak je častica viazaná v potenciálovej jame, jej energia nadobúdajú iba určité špeciálne hodnoty z diskretného spektra energií, ktoré môžeme nájsť B-S podmienkou. Kvantovanie energie je dôsledok normovateľnosti vlnovej funkcie. Keď energie prevyšuje vrchol potenciálovej jamy, neobjavujú sa žiadne diskretné riešenia a prípustná je ľubovoľná hodnota energie.

### 3.1.1 Aplikácie B-S podmienky

Pre ilustráciu preanalýzujeme použitím B-S podmienky niektoré sústavy, s ktorými sme sa stretli v predchádzajúcich kapitolách. Pre jednoduchosť  $J_0 = 0$ .

#### 3.1.2 Harmonický oscilátor

Matematický opis LHO je jednoduchý a oblasť aplikácií neobyčajne široká. Na častica s hmotnosťou  $m$  pôsobí sila, ktorá je priamo úmerná výchylke  $x$  a má opačný smer:  $F = -kx$ . Pretože  $F = -\frac{dU}{dx}$  potenciálna energia  $U(x)$  je daná výrazom  $U = \frac{1}{2}kx^2$ . Celková mechanická energia sústavy  $E$  sa zachováva:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 = \text{konšt} \quad (3.9)$$

Častica vykonáva harmonický kmitavý pohyb s uhlovou frekvenciou  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ . V krajnej polohe  $x = x_0$  je kinetická energia nulová

$$E = \frac{1}{2}kx_0^2 \Rightarrow x_0 = \sqrt{\frac{2E}{k}} \quad (3.10)$$

Dosaďme (3.10) do ZZE a vyjadríme hybnosť:

$$p = \sqrt{k(x_0^2 - x^2)} m$$

Podmienka B-S nadobudne nasledovný tvar:

$$nh = \oint p dx \sqrt{k(x_0^2 - x^2)} m = 2 \int_{-x_0}^{x_0} dx \sqrt{k(x_0^2 - x^2)} m \quad (3.11)$$

Zavedením substitúcie  $x = x_0 \sin \varphi$

$$nh = 2 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi \sqrt{mk} x_0 \cos \varphi = 2\sqrt{mk} x_0 \left( \frac{1}{2} \pi \right) \quad (3.12)$$

Vyjadríme energiu

$$E = \sqrt{\frac{k}{m}} n \hbar = n \hbar \omega \quad (3.13)$$

Z princípu neurčitosti sme pre najnižšiu energiu LHO odvodili vzťah  $E_{\min} = \frac{1}{2} \hbar \omega$ . Jej pripočítaním k (3.13) dosiahneme rovnaký výsledok ako exaktným riešením Schr (viď dodatok):

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (3.14)$$

### Výberové pravidlá

Vzájomná vzdialenosť susedných energetických hladín je konštantná:  $E_{n+1} - E_n = \hbar \omega$ . Kvantový oscilátor je schopný, aspoň na prvý pohľad, absorbovať resp. emitovať žiarenie rôznych frekvencie  $\Omega$ , ktoré sú násobkami vlastnej frekvencie  $\omega$ :  $\Omega = \frac{\Delta E}{\hbar} = n\omega$ . Výberové pravidlá, presahujúce rámec tohto kurzu, však pripúšťajú len také prechody, pri ktorých  $\Delta n = \pm 1$ . K tomuto tvrdeniu sa možno dopracovať aj na základe princípu korrespondencie: Klasické stavy sú charakterizované vysokým kvantovým číslom  $n \rightarrow \infty$ . Amplitúdy oscilácií závisia od frekvencie  $\Omega$  vynucujúcej sily  $F = E_0 \cos \Omega t$  a majú rezonančný charakter:

$$A = \frac{E_0}{m(\omega^2 - \Omega^2)}$$

Oscilácie sa realizujú pri vlastnej frekvencii systému  $\Omega = \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ . V klasickej fyzike teda existujú výberové pravidlá, zakazujúce prechody cez niekoľko energetických úrovní. Pretože ich hodnoty nezávisia od kvantového čísla, možno očakávať platnosť rovnakého pravidla pre ľubovoľné  $n$ .

### Porovnanie klasického a kvantového oscilátora

Pravdepodobnosť výskytu klasického oscilátora v oblasti  $x + dx$  je úmerná času  $dt$ , ktorý strávi oscilátor z celkovej periódy  $T$  v sledovanej oblasti. :

$$P(x) = \frac{dt}{T} = \frac{\frac{dx}{v}}{T} = \frac{dx}{vT} \quad (3.15)$$

Vyjadríme rýchlosť oscilátora ako funkciu výchylky  $x$ :

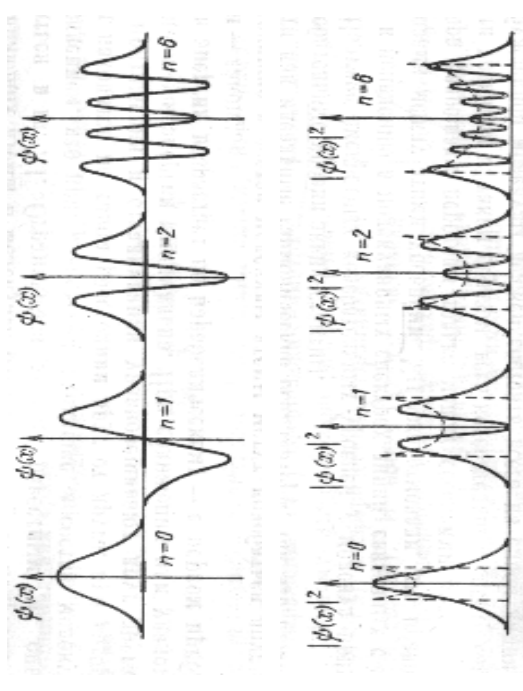
$$x = A \cos(\omega t + \varphi) \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} v &= -A\omega \sin(\omega t + \varphi) = -A\omega \sqrt{1 - \cos^2(\omega t + \varphi)} = \\ &= -A\omega \sqrt{1 - \left(\frac{x}{A}\right)^2} \end{aligned} \quad (3.17)$$

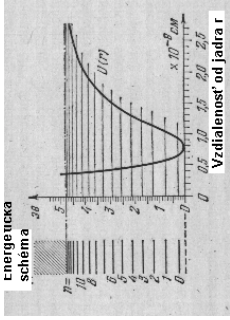
Pre hustota pravdepodobnosti výskytu klasického oscilátora potom platí:

$$P(x) = -\frac{dx}{A\omega T \sqrt{1 - \left(\frac{x}{A}\right)^2}} \quad (3.18)$$

Na obrázkoch je porovnaný priebeh vlnovej funkcie  $\psi$ ,  $|\psi|^2$  s klasickou predpoveďou  $P(x)$ .



Klasický oscilátor sa s najväčšou pravdepodobnosťou vyskytuje v krajných polohách, kde je jeho rýchlosť nulová, kvantový zase v oblastiach s maximálnym kvadrátom  $\psi$ . Zväčšovaním kvantového čísla  $n$  sa stráca rozdiel medzi oboma režimami, čo je v súlade s princípom korrespondencie. Kvantový oscilátor preniká aj do oblasti pre klasickú fyziku neprístupných  $(-A, A)$ , pričom zase naopak existujú body neprístupné pre kvantový oscilátor ( $\psi = 0$ ).



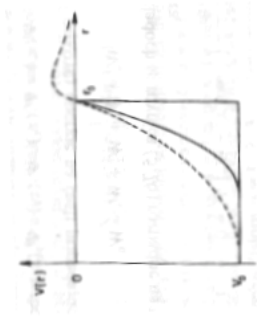
Obrázok 3.1:

### Energie dvojatómových molekúl

Teória kvantového oscilátora má vo fyzike široké uplatnenie. Uvedme aspoň niekoľko príkladov: Na obrázku je znázornená závislosť potenciálnej energie dojatómovej molekuly vodíka od medzijadrovej vzdialenosti  $r$ . V oblasti minima sa tvar efektívneho potenciálu približuje k parabole a preto energetické hladiny molekuly v tejto oblasti budú ekvidistantné:

#### Vrstevnicový model jadra

Existencia diskretných hodnôt väzbovej energie nukleónov a magických čísel dokazuje, že podobne ako v atómovom obale aj v jadre existuje sústava diskretných energetických hladín. Na vybraný nukleón pôsobia len sily, ktoré sú v jeho najbližšom okolí. Ak aproximujeme krivku potenciálnej energie jamou s tvarom paraboly, nukleón sa bude správať ako priestorový oscilátor



Dôsledkom nezávislosti jednotlivých zložiek pre jeho celkovú energiu platí:

$$E = \left( n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) \hbar \omega \quad (3.19)$$

Zavedme hlavné kvantové číslo:

$$n = n_1 + n_2 + n_3 + 1 \quad (3.20)$$

a pre energia dostaneme:

$$E = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (3.21)$$

Dané  $n$  môžeme získať súčtami rôznych hodnôt  $n_1, n_2, n_3$ . Stupeň degenerácie určíme nasledovne: Nech  $n_1 + n_2 = k$  a  $n_3 = n - k - 1$ . Pri pevnom  $k$  má aj  $n_3$  stálu hodnotu. Existuje však  $k+1$  takých dvojíc  $(n_1, n_2)$ , pre ktoré  $n_1 + n_2 = k$ . Celkový počet stavov  $N$  pre dané  $n$ :

$$N = \sum (k+1) = \frac{1}{2} n(n+1) \quad (3.22)$$

So zreteľom na dve možnosti orientácie spinu sa tento počet sa zdvojnásobi:

$$N = n(n+1)$$

Pre kvantové čísla  $n = 1, 2, 3, 4, 5$  je počet stavov  $N = 2, 6, 12, 20$  a ich súčet 2, 8, 20, 40, 70. Tieto čísla sa nazývajú magickými a udávajú počet nukleónov potrebných na úplné obsadenie energetických hladín s kvantovým číslom  $n$ . Jadrá s uvedenou konfiguráciou sú veľmi stabilné. S experimentálne zistenými magickými číslami súhlasia len prvé tri čísla. Pre ostatné stavy treba započítať vplyv spinovo-orbitálnej väzby medzi nukleónmi, čo je však presahuje rámec tohto kurzu.

### 3.1.3 Častica viazaná v krabici

Častica s hmotnosťou  $m$  sa pohybuje v potenciálovej jame a je viazaná na oblasť  $0 < x < L$ . Celková energia  $E = \frac{p^2}{2m}$ . Podľa B-S podmienky

$$n\hbar = \oint p dx = 2 \int_0^L dx \sqrt{2mE} = 2L\sqrt{2mE} \quad (3.23)$$

$$E = \frac{1}{2m} \left( \frac{n\hbar}{2L} \right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi}{L} \right)^2 n^2 \quad (3.24)$$

čo je totožné s exaktným riešením SchR (1.27).

### 3.1.4 Atóm vodíka

Ak predpokladáme, že elektrón sa pohybuje po kružnici s polomerom  $r$ , potom dostredivá sila  $F_d$ , ktorá ho udržiava na orbite, je elektrostatičná a pre stabilnú dráhu musí byť splnená podmienka:

$$F_d = F_e \implies \frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \quad (3.25)$$

Podľa odvodeného Bohrovho postulátu:

$$n\hbar = \oint p dx = p \oint dx = 2\pi r p = 2\pi r m v \quad (3.26)$$

Z posledných dvoch rovníc pre polomer  $n$ -tej dráhy vyplýva:

$$r_n = \frac{\varepsilon_0 n^2 \hbar^2}{\pi m e^2} \quad (3.27)$$

Celková energia  $E$  elektrónu v atóme vodíka je daná súčtom kinetickej  $T = \frac{1}{2}mv^2$  a potenciálnej energie  $V = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{r}$

$$E = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{r} = -\frac{1}{8\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (3.28)$$

Dosadením za  $r_n$ :

$$E_n = -\frac{m e^4}{8\varepsilon_0^2 \hbar^2} \left( \frac{1}{n^2} \right) \quad (3.29)$$

Energetické hladiny atómu vodíka sú záporné, čo znamená, že elektrón nemá dostatok energie, aby ho opustil. Najnižšia energetická hladina  $E_1 = 2,17 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 13,6 \text{ eV}$  zodpovedá energii odvodenej z princípu neurčitosti. S podmienkou (??) sme sa už stretli na strednej škole v trochu inom tvare. Je totiž ekvivalentná tvrdeniu, že stabilné dráhy sú len tie, na ktoré sa zmesť celistvý násobok de Broglieho vlnovej dĺžky. Možno sa o tom presvedčiť' jednoduchými úpravami :

$$\begin{aligned} n\hbar &= \oint p dx = p 2\pi r = \frac{\hbar}{\lambda} 2\pi r \\ 2\pi r &= n\lambda \end{aligned} \quad (3.30)$$

Princípu korešpondencie predpokladá, že kvantová a klasická fyzika vedú k rovnakým výsledkom pri limite  $\hbar \rightarrow 0$ . Overme, či je tomu tak aj v atóme vodíka: V klasickej fyzike sa častica nachádza v stave s vysokým kvantovým číslom:

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} n = \lim_{\hbar \rightarrow 0} \sqrt{\frac{\pi m e^2 r}{\varepsilon_0 \hbar^2}} \longrightarrow \infty \quad (3.31)$$

Podľa klasickej elektromagnetickej teórie elektrón polybujúci sa po kruhovej dráhe, vyžaruje elektromagnetické vlny s frekvenciou jeho obehu.

$$v_{\text{klas}} = \frac{1}{T} = \frac{v}{2\pi r} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 m}} r^{-\frac{3}{2}} \quad (3.32)$$

Podľa kvantovej mechaniky pri prechode z kvantového stavu  $n$  do ľubovoľného  $m < n$  sa emitujú fotóny s energiou  $\Delta E = E_n - E_m$ . Vzhľadom na to, že

v klasickej fyzike sa mení energia spojit, budeme v limitnom prípade vyšetrovať len energetické prechody, medzi susednými hladinami t.j.  $n \rightarrow n-1$ :

$$\Delta E = E_n - E_{n-1} = -\frac{m e^4}{8\varepsilon_0^2 \hbar^2} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n-1)^2} \right) = \quad (3.33)$$

$$= -\frac{m e^4}{8\varepsilon_0^2 \hbar^2} \left( \frac{(n-1)^2 - n^2}{n^2 (n-1)^2} \right) = \frac{m e^4}{8\varepsilon_0^2 \hbar^2} \frac{2n-1}{n^2 (n-1)^2} \quad (3.34)$$

V klasickej limite  $\hbar \rightarrow 0$

$$\Delta E = \frac{m e^4}{8\varepsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^3} = \frac{m e^4}{8\varepsilon_0^2 \hbar^2} \left( \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \hbar^2}{\pi m e^2 r}} \right)^3 \quad (3.35)$$

a frekvenciu

$$v_{\text{kvant}} = \frac{\Delta E}{\hbar} = \frac{m e^4}{8\varepsilon_0^2 \hbar^3} \left( \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \hbar^2}{\pi m e^2 r}} \right)^3 \quad (3.36)$$

Tým sme ukázali, že výsledky kvantovej mechaniky pre vysoké hodnoty  $n$  sú totožné s klasickou fyzikou.

**[3.1.\*]** Kvantovo-mechanické matematické kyvadlo sa nachádza v gravitačnom poli a kmitá v jednej rovine. V mieste rovnovážnej polohy, kolmo na dráhu závažia je umiestnená dokonale odrazajúca stena. Určte spektrum energií tohto kyvadla pre malé výchylky. Výsledky porovnajte s klasickým matematickým kyvadlom.

**[3.2.]** Určte spektrum energií kvantovo-mechanického harmonického oscilátora v elektrickom poli s intenzitou  $E$ .

**[3.3.]** Určte energiu nulových kmitov matematického kyvadla s dĺžkou  $l = 1 \text{ m}$  a hmotnosťou  $m = 1 \text{ kg}$ .

z centra ich spektier. Amplitúda výslednej vlny je modulovaná faktorom v zložených zátvorkách. Pravdepodobnostné rozloženie výskytu častice v priestore charakterizuje kvadrát vlnovej funkcie

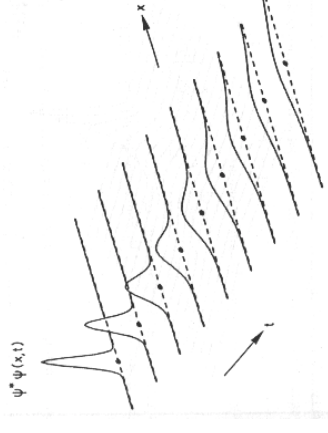
$$\Psi(x, t) \Psi^*(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\sigma_p}} \left[ \frac{2\pi\sigma_p^2 m}{\sqrt{m^2 + (\hbar\sigma_p^2 t)^2}} \right] \exp \left[ -\frac{(x - \frac{p}{m}t)^2}{\left(\frac{1}{\sigma_p^2} + \frac{\hbar^2 t^2}{m}\right)} \right] \quad (4.4)$$

Funkcia má tvar pŕku, pričom poloha maxima je určená exponentom  $x - \frac{p}{m}t \Rightarrow x = \frac{p}{m}$ . Vlnový balík (jeho maximum) sa pohybuje rýchlosťou klasickej častice s hybnosťou  $p$ . Jeho dráhu možno stotožniť s klasickou trajektóriou. Táto analógia má však svoje ohraničenie, spojené s rozptylom vlnového balíka. Ak napríklad v čase  $t = 0$  má vlnový balík rozmer  $(\Delta x)_0$ , podľa princípu neurčitosti šírka hybnostného spektra de Broglieho vln bude v intervale  $\Delta p \sim \frac{\hbar}{(\Delta x)_0}$  s rozptylom rýchlostí jednotlivých zložiek:

$$\Delta v \sim \frac{\Delta p}{m} \sim \frac{\hbar}{m (\Delta x)_0}$$

Tieto neurčitosti v rýchlostiach vedú k zväčšovaniu rozmerov balíka, ktorý prestáva byť lokalizovaný, a už ho nemožno stotožňovať s pôvodnou časticou. Datočné rozplynutie bude narastať s časom:

$$(\Delta x) \sim \Delta vt = \frac{\hbar t}{m (\Delta x)_0}$$



### Častice v silovom poli.

V kapitole 3 sme vyšetřovali chovanie monochromatických de Broglieho vln pri rozptyle na potenciálových schodoch. Zistili sme, že vlny sa čiastočne odrazajú a prechádzajú z jedného prostredia do druhého, pričom koeficienty odraznosti a priepustnosti  $R$  a  $T$  závisia od ich hybnosti. Vytvorme vlnové klbká z de Broglieho vln a znázorníme ich časový a priestorový vývoj. Bodky budú reprezentovať polohu klasickej častice s rovnakou hybnosťou ako je stredná hybnosť kvantovo-mechanického balíka. Uvažujme o niekoľkých prípadoch:

## Kapitola 4

# Vlnový balík-prostriedok na zobrazenie trajektórie klasických častíc

### 4.1 Voľná častica

Uvažujme kvantovo-mechanický opis voľnej častice, ktorá sa pohybuje v smere osi  $x$  k potenciálovému schodu. V čase  $t_0$  je lokalizovaná okolo bodu  $x = x_0$  a reprezentovaná vlnovým balíkom (kapitola 2) vzniknutým superpozíciou rovinných de Broglieho vln:

$$\Psi = \int_{-\infty}^{\infty} f(p) e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} dp \quad (4.1)$$

ktorých hybnosti sú gaussovsky rozmazané s neurčitosťou  $\sigma_p^2$  v okolí hodnoty  $p_0$  a ich spektrálna funkcia:

$$f(p) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\sigma_p}} \exp \left[ -\frac{(p - p_0)^2}{4\sigma_p^2} \right] \quad (4.2)$$

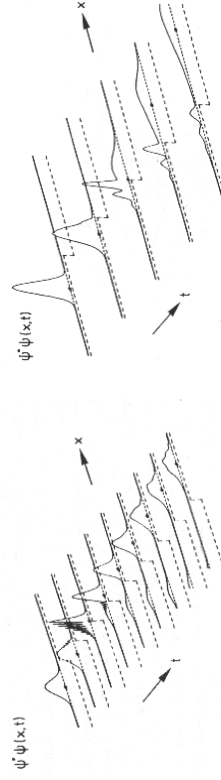
Dosadením do (4.1) a využitím Laplaceovho integrálu dostane časový vývoj systému :

$$\Psi(x, t) = \left\{ \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\sigma_p}} \left[ \frac{2\pi\sigma_p^2 m}{m + i\hbar\sigma_p^2 t} \right]^{\frac{1}{2}} \exp \frac{-\left(x - \frac{p}{m}t\right)^2}{2\left(\frac{1}{\sigma_p^2} + \frac{\hbar^2 t^2}{m}\right)} \right\} e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} \quad (4.3)$$

Výraz pozostáva so súčinnu dvoch členov. Jeden z nich  $e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$  reprezentuje rovinnú monochromatickú de Broglieho vlnu s uhlovou frekvenciou a hybnosťou

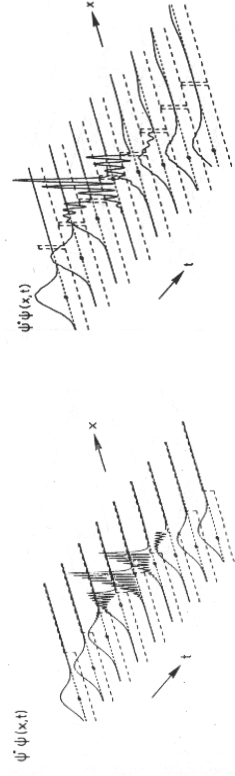
a,  $E > V$ .

Klasická častica sa pohybuje v prostredí I rýchlosťou  $v = \sqrt{2m(E)}$  a pri prechode do druhého prostredia sa okamžite spomalí na rýchlosť  $v = \sqrt{2m(E - V)}$ . Parciálne de Broglieho vlny tvoriace vlnový balík sa čiastočne odražia na schode s koeficientom  $R(p)$  a čiastočne prechádzajú s  $T(p)$ . Z odrazených a prechádzajúcich vln vznikajú nové klbká pohybujúce sa v opačných smeroch. Zvlnená štruktúra v blízkosti schodu je spôsobená ich interferenciou. Tvary sa deformujú podľa váhovej funkcie  $T(p)$  a  $R(p)$ . Situácia pre prítlačlivý potenciál  $V < 0$  je veľmi podobná so situáciou na obr. Klasická častica je na rozhraní náhle urýchlená. Z hľadiska kvantovej mechaniky sa však musí časť vlnového balíka odraziť; pretože pre jednotlivé zložky  $R(p) \neq 0$ .



b,  $E < V$ .

V tomto prípade časť vlnového balíka preniká s exponenciálnym poklesom do oblasti II, ktorá je pre klasické častice neprístupná. Je to len logickým dôsledkom správania sa jednotlivých zložiek vlnového balíka, ako sme sa o tom zmieňovali v kapitole 2. Nakoniec sa vlnový balík úplne odrazí. Prenikanie do oblasti II je analogické s odrazom svetla od povrchu kovu.



c, *Tunelovanie*.

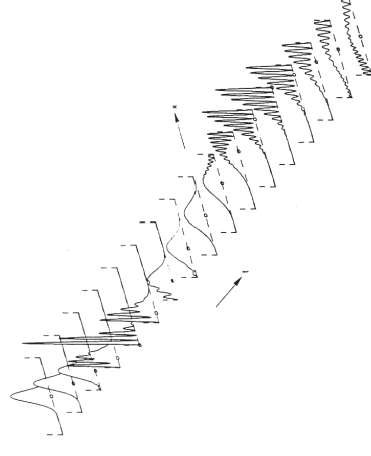
Obr.?? je znázornená šírka je totožná s hĺbkou vniku. Na vstupnej časti bariéry pozorujeme očakávaný odrazový balík, pričom na výstupnej sa tiež formuje balík postupujúci doprava. Jeho veľkosť závisí od parametrov bariéry. Výsledok potvrdzuje, že častica opísaná pôvodným Gaussovým balíkom prejde cez potenciálnu bariéru

## 4.2 Pohyb častice v nekonečne hlbokoj pravouhlej potenciálovej jame.

V kapitole sme získali stacionárne riešenia Schr. Vlnová funkcia v čase  $t$  je daná superpozíciou stacionárnych stavov vynásobených faktorom  $\exp(-i\frac{E_n}{\hbar}t)$

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(p_0, x_0) \psi_n(x) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) \quad (4.5)$$

kde  $a_n$  - zvolíme tak, aby funkcia mala v čase  $t = 0$  tvar zvonu v okolí bodu  $x_0$  a strednú hybnosť  $p_0$ . Nasledujúci obrázok ilustruje priebeh hustoty pravdepodobnosti  $\Psi\Psi^*$  v prípade, keď v čase  $t = 0$  bol lokalizovaný okolo začiatkovej polohy klasckej častice:



Vlnový balík naráža na stenu, od ktorej sa odraza. V mieste odrazu nastáva interferencia medzi odrazenými a dopadajúcimi zložkami de Broglieho vln tvoriace klbko, čo sa prejavuje zvlneniami. Na spätočnej ceste nadobúda opäť typický zvonovitý tvar. Dôsledkom disperzie sa balík neustále rozširuje. Len čo je širší ako samotná jama dochádza k súčasnej interferencii na oboch koncoch jany a preto vlnová funkcia je zvlnená. Balík sa celkom nerozplynie ani po dostatočnom čase a rozdelenie hustoty pravdepodobnosti nebude homogénne ako v prípade klasckej častice. Drží si charakteristickú štruktúru a stredná poloha klbka zodpovedá polohe klasckej častice.

Všetky energie  $E_n$  sú celočíselnými násobkami energie základného stavu  $E_1$  a preto perióda vlnová funkcia  $\Psi(x, t)$  je  $T = \frac{2\pi}{\omega_1} = \frac{2\pi\hbar}{E_1}$ .

$$\begin{aligned}
\Psi(x, t + T) &= \sum_{n=1}^{\infty} a_n(p_0, x_0) \psi_n(x) \exp \left[ -\frac{iE_n}{\hbar}(t + T) \right] = \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} a_n(p_0, x_0) \psi_n(x) \exp \left[ -\frac{inE_1}{\hbar}(t + \frac{2\pi\hbar}{E_1}) \right] = \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} a_n(p_0, x_0) \psi_n(x) \exp \left[ -\frac{inE_1}{\hbar}t - in2\pi \right] = \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} a_n(p_0, x_0) \psi_n(x) \exp \left[ -\frac{inE_1}{\hbar}t \right] = \Psi(x, t) \quad (4.6)
\end{aligned}$$

Vlnový balík sa po uplynutí času  $T$  vráti do pôvodného tvaru. Períodu  $T$  je však vo všeobecnosti oveľa dlhšia ako perióda oscilácií častice v jame  $T_c = \frac{2\pi\hbar}{v}$ .

### 4.3 Lineárny harmonický oscilátor.

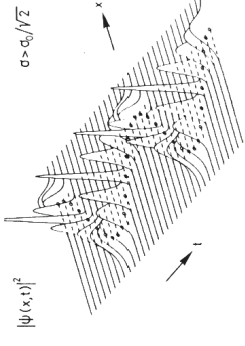
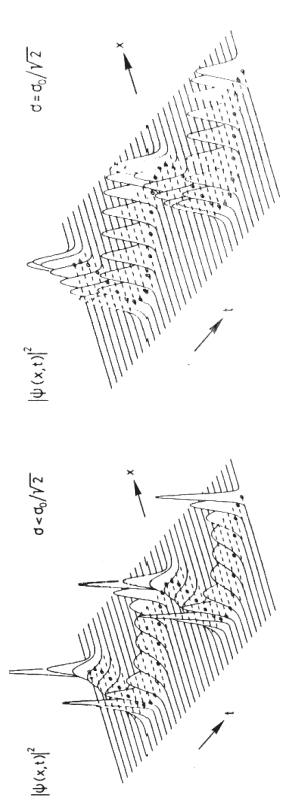
Časovo závislé riešenie Schr pre časticu pohybujúcu sa vplyvom harmonickej sily je podobné ako v predchádzajúcej časti

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(p_0, x_0) \psi_n(x) \exp \left[ -\frac{inE_1}{\hbar}t \right] \quad (4.7)$$

kde  $\psi_n(x)$  sú vlastné funkcie LHO, pričom  $E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar\omega$ . Nekonečnú sumu možno sčítať. Z dôvodov stručnosti uvedieme iba výsledok pre hustotu pravdepodobnosti:

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{2\sigma}{\sqrt{(\sigma_0^4 s^2 + 4\sigma^4 c^2)}} \exp \left[ -\frac{2\sigma^2(x - cx_0)^2}{\sigma_0^4 s^2 + 4\sigma^4 c^2} \right] \quad (4.8)$$

kde  $c = \cos\omega t$ ,  $s = \sin\omega t$ . Funkcia  $\Psi(x, t)$  má periódu  $T = \frac{2\pi}{\omega}$  z rovnakých dôvodov ako v predchádzajúcej časti. Na obrázku je znázornený časový priebeh gaussovského vlnového balíka, hustotou pravdepodobnosti  $\Psi(x, t) \Psi(x, t)^*$ . Ak



začiatočná šírka balíka je väčšia ako šírka základného stavu oscilátora  $\sigma < \frac{\sigma_0}{\sqrt{2}}$  časová závislosť jeho strednej polohy vykonáva rovnaké oscilácie ako zodpovedajúca klasická častica. Šírka osciluje s dvojnásobnou frekvenciou oscilátora a za prvú štvrtinu periódy  $\frac{T}{4}$  narastá na svoju maximálnu hodnotu. Ak je počiatočná šírka  $\sigma > \frac{\sigma_0}{\sqrt{2}}$ , rozširovanie píku má opačnú tendenciu a za prvú štvrtinu periódy  $\frac{T}{4}$  sa zužiuje na svoju minimálnu hodnotu. Prípád  $\sigma = \frac{\sigma_0}{\sqrt{2}}$  predstavuje hranicu medzi oboma prípadmi, kedy sa jeho šírka počas oscilácií nemení. Správanie sa strednej hodnoty polohy je vo všetkých prípadoch identické a totožné so správaním sa klasickej častice.

**4.1\*** Častica je viazaná v nekonečnej jame so šírkou  $L$ . V čase  $t = 0$  s sa nachádza v stave, ktorý je lineárnou superpozíciou dvoch stacionárnych stavov, odpovedajúcim energiám  $E_{17} = 17^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$  a  $E_{18} = 18^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$ . Nájdite vlnovú funkciu  $\psi$  v čase  $t = 0$  s, za predpokladu, že váha oboch stavov je rovnaká. b, Nájdite normovanú vlnovú funkciu pre ľubovoľný čas  $t$ . c, Zakreslite hustotu pravdepodobnosti v časoch  $t = 0$ ,  $t = \frac{t_0}{4}$ ,  $t = \frac{t_0}{2}$ ,  $t = \frac{3t_0}{4}$ ,  $t = t_0$ , kde  $t_0$  je perióda kmitania vlnového balíka. c, Vyšetrite pohyb klasickej častice s hmotnosťou  $m$  a energiou  $E = \frac{1}{2} (E_{17} + E_{18})$  a porovnajte periódu jej pohybu s  $t_0$ .

Z matematického hľadiska je prípustný aj prípad s kladným exponentom, ale ten vedie k nenormovateľným vlnovým funkciám. Vypočítame derivácie  $\psi$ :

$$\begin{aligned}\psi' &= -2\gamma Ax \exp(-\gamma x^2) \\ \psi'' &= -2\gamma A(\exp(-\gamma x^2) - 2\gamma x \exp(-\gamma x^2))\end{aligned}$$

a dosadíme ich do (5.1)

$$-2\gamma(1 - 2\gamma x^2) + \lambda - \alpha^2 x^2 = 0$$

Porovnaním koeficientov pri jednotlivých mocninách:  $\lambda = 2\gamma$  a  $4\gamma^2 = \alpha^2 \Rightarrow \gamma = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{mk}{\hbar^2}}$  určíme najnižšiu energiu oscilátora  $E = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{k}{m}} \hbar$ , ktorá zodpovedá hodnote určenej z princípu neurčitosti. Po znormovaní vlnovej funkcie  $\psi_0 = \pi^{-\frac{1}{4}} \exp(-\frac{\alpha x^2}{2})$ .

Pomocou základného stavu  $\psi_0$ , budeme hľadať aj ďalšie stavy. Stačí si uvedomiť, že derivovaním funkcie  $\psi$  sa postupne v jej Fourierovom obraze vytvára multiplikačný faktor  $ip/\hbar$

$$\psi(x) = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx/\hbar} \tilde{\psi}(p) \Rightarrow \psi'(x) = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi}} ip/\hbar e^{ipx/\hbar} \tilde{\psi}(p)$$

Ak napríklad  $f(x) \equiv \psi_0'(x) = -2\gamma x e^{-\gamma x^2}$  potom  $f(p) = 2\gamma ip/\hbar \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} \exp(-\gamma x^2)$ . Aj v tomto prípade platí,  $f(u) \sim \mathcal{F}[f(u)]$ , preto pre vlnovú funkciu ďalšieho stavu zrejme platí:  $\psi = x A e^{-\gamma x^2}$ . Po vykonaní príslušných derivácií, dosadením do (5.1) a porovnaním koeficientov pri jednotlivých mocninách dostaneme

$$\begin{aligned}E &= \frac{3}{2} \hbar \omega \\ \psi_1 &= \frac{\sqrt{2}}{\pi^{\frac{1}{4}}} x \exp(-\frac{\alpha}{2} x^2)\end{aligned}$$

Nanešťastie tento postup zlyháva pri hľadaní vlnových funkcií vyšších stavov. Základná vlastnosť Fourierových transformácií sa samozrejme zachováva t.j. ak  $f(u) \equiv \psi_0'(u)$  potom  $\mathcal{F}[f(u)] = -u^2 \mathcal{F}[\psi_0(u)]$  ale prestáva platiť, že funkcia sa líši od svojho fourierového obrazu iba multiplikačným faktorom. Skutočne  $f(u) = k_1(1 - u^2)\psi_0(u)$  nie je úmerné  $\mathcal{F}[f(u)] = -k_2 u^2 \mathcal{F}[\psi_0(u)]$ . Zdokonaľme náš postup a hľadáme vlnové funkcie vo voľnejšom tvare, v ktorom vlnovú funkciu základného stavu vynásobíme polynómom:

$$\psi_n(x) = \left( \sum_{n=0}^N b_n x^n \right) \exp(-\alpha x^2/2) = f(x) \exp(-\alpha x^2/2)$$

## Kapitola 5

## Dodatok

### 5.1 Lineárny harmonický oscilátor - LHO.

#### 5.1.1 a, LHO cez SCHR

Hodnoty energie harmonického oscilátora získame riešením Schrödingerovej rovnice:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} k x^2 = E\psi$$

Zavedíme premenné  $\lambda = \frac{2m}{\hbar^2} E$ ,  $\alpha^2 = \frac{mk}{\hbar^2}$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\lambda - \alpha^2 x^2) \psi = 0 \quad (5.1)$$

Rovnicu (5.1) prepíšeme v hybnostnej reprezentácii, pomocou fourierových obrazov:

$$\frac{d^2\tilde{\psi}}{dp^2} + (\lambda - \alpha^2 x^2) \tilde{\psi} = 0 \quad (5.2)$$

kde

$$\psi(x) = \mathcal{F}[\tilde{\psi}] = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx/\hbar} \tilde{\psi}(p)$$

Porovnaním (5.1) a (5.2) zistujeme, že  $\psi$  a  $\tilde{\psi}$  sú riešeniami tých istých rovníc a preto sa môžu od seba líšiť iba konštantou úmernosti. Vlnová funkcia  $\psi$  je svojím vlastným Fourierovým obrazom  $\tilde{\psi}$ . Pri odvodzovaní princípu neurčitosti sme sa s funkciou uvedenej vlastnosti už stretli. Bola to gaussovská funkcia

$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}}$  ktorej Fourierova transformácia mala tvar  $f(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_p} e^{-\frac{p^2}{2\sigma_p^2}}$  ( $\sigma_p \sigma_x = \frac{\hbar}{2}$ ). Naším prvým typom na riešenie (5.1) bude  $\psi = A e^{-\gamma x^2}$ ,  $\gamma > 0$ .

1

Pre zjednodušenie ďalších výpočtov, aby nám v exponente nevystupoval súčin  $\alpha x^2$  zavedieme substitúciu  $\sqrt{\alpha}x = \xi$  a pretransformujeme rovnicu (5.1) do týchto súradníc. Keďže  $f(x) \rightarrow H(\xi)$ ;  $f' = \sqrt{\alpha}H'$ ;  $f'' = \alpha H''$  potom

$$H'' - 2\xi H' + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - 1\right) H = 0 \quad (5.4)$$

Riešenie hľadáme v tvare mocninového radu:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k \\ H' &= \sum_{k=1}^{\infty} k a_k \xi^{k-1} \\ H'' &= \sum_{k=2}^{\infty} k(k-1) a_k \xi^{k-2} \end{aligned}$$

Dosadením do (5.4):

$$\sum_{k=2}^{\infty} k(k-1) a_k \xi^{k-2} - \sum_{k=1}^{\infty} 2k a_k \xi^k + \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\lambda}{\alpha} - 1\right) a_k \xi^k = 0 \quad (5.5)$$

porovnáme koeficienty u rovnakých mocnín:

$$(\nu+2)(\nu+1) a_{\nu+2} + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - 1 - 2\nu\right) a_{\nu} = 0 \quad (5.6)$$

získame rekurentný vzťah pre koeficienty  $a_{\nu}$ :

$$a_{\nu+2} = \frac{2\nu+1-\frac{\lambda}{\alpha}}{(\nu+1)(\nu+2)} a_{\nu}. \quad (5.7)$$

<sup>1</sup>Pre rovnice ( ) existuje všeobecnejší postup riešenia spočívajúci v hľadaní riešenia v okolí singulárnych bodov t.j pre veľké  $|x| \rightarrow \infty$ , resp. pre  $\alpha|x| \gg \lambda$  V tomto prípade zrejme platí:

$$\frac{d^2\psi(\infty)}{dx^2} - \alpha^2 x^2 \psi(\infty) = 0 \quad (5.3)$$

z čoho

$$\psi(\infty) = C_1 e^{\frac{\alpha}{2}x^2} + C_2 e^{-\frac{\alpha}{2}x^2}$$

aby bola funkcia  $\psi$  konečná aj pre  $|x| \rightarrow \infty$  a teda normovateľná potom  $C_1 = 0$  a  $\psi(\infty) = C_2 e^{-\frac{\alpha}{2}x^2}$ . Exaktné riešenie (1) sa ďalej hľadá pomocou "variácie konštánty":  $\psi = f(x) e^{-\frac{\alpha}{2}x^2}$

Riešenie Schr nemožno preto vyjadriť pomocou takéhoto nekonečného radu. Jedna z možností ako zabezpečiť jeho konvergentnosť je „odseknuť“ členov s vysokými mocninami t.j obmedzením stupňa polynómu  $n$ . V tomto prípade bude  $a_n \neq 0$ , ale  $a_{n+2} = 0$ .

Zo (5.7)  $\Rightarrow 2n+1-\frac{\lambda}{\alpha} = 0$ ,  $\lambda = (2n+1)\alpha$ . Dosadením za  $\lambda$  a  $\alpha$ :

$$\frac{2m}{\hbar^2} E = (2n+1) \frac{2\pi m v_0}{\hbar}$$

$$E = E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \nu$$

Pre každú energiu zodpovedá vlnová funkcia  $\psi_n = N_n \exp(-\frac{\xi^2}{2}) H_n$ , kde  $N_n$  je normovacia konštanta a  $\xi = \sqrt{\alpha}x = 2\pi \sqrt{\frac{m v_0}{\hbar}} x$ .

$H_n(\xi)$  je polynóm  $n$ -tého stupňa v  $\xi$ , tzv. Hermitov polynóm:  $H_0(\xi) = 1$ ,  $H_1(\xi) = 2\xi$ ,  $H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$ . Vlnová funkcia je buď párna alebo nepárna podľa toho či  $a_0 = 0$  alebo  $a_1 = 0$ .

## 5.2 Podbariérový prechod.

Ak častica s  $E < U_0$  prechádza cez potenciálové pole s nasledovnou štruktúrou, hovoríme o podbariérovom prechode:

$$U = \begin{cases} U = 0 & x < 0 \\ U = U_0 & 0 \leq x \leq a \\ U = 0 & x > a \end{cases} \quad (5.8)$$

Riešenie Schr rovnice v jednotlivých oblastiach nájdeme veľmi jednoducho:

$$\psi_I = A_1 \exp(ikx) + A_2 \exp(-ikx) \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (5.9)$$

$$\psi_{II} = B_1 \exp(\gamma x) + B_2 \exp(-\gamma x) \quad \gamma = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} \quad (5.10)$$

$$\psi_{III} = C_1 \exp(ikx) + C_2 \exp(-ikx) \quad (5.11)$$

Člen  $C_2 \exp(-ikx)$  popisuje častice postupujúce za valom doláva. Pretože častice dopadajú zľava  $C_2 = 0$ . Zo spojitosti vlnových funkcií a ich derivácií v bodoch  $x = 0$ ,  $x = a$  vyplýva:

$$A_1 + A_2 = B_1 + B_2 \quad (5.12)$$

$$B_1 \exp(\gamma a) + B_2 \exp(-\gamma a) = C_1 \exp(ika) \quad (5.13)$$

$$ikA_1 - ikA_2 = \gamma B_1 - \gamma B_2 \quad (5.14)$$

$$\gamma B_1 \exp(\gamma a) - \gamma B_2 \exp(-\gamma a) = ikC_1 \exp(ika) \quad (5.15)$$

Chceme určiť koeficient priepustnosti  $T$  pre ktorý platí:

$$T = \frac{\text{počet častíc, ktoré prešli valom}}{\text{počet častíc dopadnutých na val}} \quad (5.16)$$

$$T = \frac{|C_1|^2}{|A_1|^2} \quad (5.17)$$

Z rovníc vypočítame preto koeficienty  $C_1$  a  $A_1$ , pričom  $B_1$  a  $B_2$  vylúčime:

$$(5.12) + \frac{1}{\gamma} (5.14) \Rightarrow \left(1 + \frac{ik}{\gamma}\right) A_1 + \left(1 - \frac{ik}{\gamma}\right) A_2 = 2B_1 \quad (5.18)$$

$$(5.12) - \frac{1}{\gamma} (5.14) \Rightarrow \left(1 - \frac{ik}{\gamma}\right) A_1 + \left(1 + \frac{ik}{\gamma}\right) A_2 = 2B_2 \quad (5.19)$$

$$\exp(-\gamma a) (5.13) + \frac{1}{\gamma} \exp(-\gamma a) (5.15) \Rightarrow$$

$$\exp(ika) \left( \exp(-\gamma a) + \frac{ik}{\gamma} \exp(-\gamma a) \right) C_1 = 2B_1 \quad (5.20)$$

$$\exp(\gamma a) (5.13) - \frac{1}{\gamma} \exp(\gamma a) (5.15) \Rightarrow$$

$$\exp(ika) \exp(\gamma a) \left(1 - \frac{ik}{\gamma}\right) C_1 = 2B_2 \quad (5.21)$$

Porovnajme (5.18) s (5.20) a (5.19) s (5.21) :

$$\left(1 + \frac{ik}{\gamma}\right) A_1 + \left(1 - \frac{ik}{\gamma}\right) A_2 = \exp(ika - \gamma a) \left(1 + \frac{ik}{\gamma}\right) C_1 \quad (5.22)$$

$$\left(1 - \frac{ik}{\gamma}\right) A_1 + \left(1 + \frac{ik}{\gamma}\right) A_2 = \exp(ika + \gamma a) \left(1 - \frac{ik}{\gamma}\right) C_1 \quad (5.23)$$

$$\left(1 + \frac{ik}{\gamma}\right) (5.22) - \left(1 - \frac{ik}{\gamma}\right) (5.23) \Rightarrow \quad (5.24)$$

$$\left[ \left(1 + \frac{ik}{\gamma}\right)^2 - \left(1 - \frac{ik}{\gamma}\right)^2 \right] A_1 = \left[ \left(1 + \frac{ik}{\gamma}\right)^2 e^{-\gamma a} - \left(1 - \frac{ik}{\gamma}\right)^2 e^{\gamma a} \right] C_1 \quad (5.25)$$

$$\frac{C_1}{A_1} = \frac{4ik\gamma e^{-ika}}{(\gamma + ik)^2 e^{-\gamma a} - (\gamma - k)^2 e^{\gamma a}} \quad (5.26)$$

Postupným upravami vypočítame koeficient priepustnosti

$$\begin{aligned} T &= \frac{|C_1|^2}{|A_1|^2} = \frac{C_1 C_1^*}{A_1 A_1^*} = \\ &= \frac{16k^2 \gamma^2}{\left[ (\gamma + ik)^2 e^{-\gamma a} - (\gamma - ik)^2 e^{\gamma a} \right] \left[ (\gamma - ik)^2 e^{-\gamma a} - (\gamma + ik) e^{\gamma a} \right]} = \\ &= \frac{16k^2 \gamma^2}{e^{2\gamma a} (\gamma^2 + k^2)^2 + e^{-2\gamma a} (\gamma^2 + k^2)^2 - (\gamma - ik)^4 - (\gamma + ik)^4} = \\ &= \frac{16k^2 \gamma^2}{(\gamma^2 + k^2)^2 (e^{2\gamma a} + e^{-2\gamma a}) - (\gamma^4 - 6\gamma^2 k^2 + k^4 + \gamma^4 - 6\gamma^2 k^2 + k^4)} = \\ &= \frac{16k^2 \gamma^2}{(\gamma^2 + k^2)^2 (e^{2\gamma a} + e^{-2\gamma a}) - 2(\gamma^2 + k^2)^2 + 16\gamma^2 k^2} = \\ &= \frac{16k^2 \gamma^2}{(\gamma^2 + k^2)^2 (e^{2\gamma a} - 2 + e^{-2\gamma a}) + 16\gamma^2 k^2} = \\ &= \frac{16k^2 \gamma^2}{(\gamma^2 + k^2)^2 \left[ \frac{1}{2} (e^{\gamma a} - e^{-\gamma a}) \right]^2 \cdot 4 + 16\gamma^2 k^2} = \\ &= \frac{16k^2 \gamma^2}{4 \cdot (\gamma^2 + k^2)^2 \sinh^2 \gamma a + 16\gamma^2 k^2} = \\ &= \left[ 1 + \frac{1}{4} \left( \frac{\gamma^2 + k^2}{k\gamma} \right)^2 \sinh^2 \gamma a \right]^{-1} = \\ T &= \left[ 1 + \frac{1}{4} \frac{U_0^2}{E(U_0 - E)} \sinh^2 \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} (U_0 - E)a \right]^{-1} \end{aligned}$$

<sup>2</sup>Koeficient priepustnosti pre veľké bariéry sa dá vypočítať nasledovne :  $T = \frac{|\psi_{III}(a)|^2}{|\psi_I(0)|^2}$ . Zo spojitosti  $\psi$  v bode  $a$  vyplýva  $\psi_{III}(a) = \psi_{III}(a)$ . Koncentrácia častíc vo vnútri valu môže len klesať, preto vplyv prvého člena  $\psi_{II}$  je zanedbateľný:

$$\begin{aligned} \psi_{II}(a) &\approx B_2 \exp(-\gamma x) \\ T &= \frac{|\psi_{III}(a)|^2}{|\psi_I(0)|^2} \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}a\right) \end{aligned}$$