Úvod do kvantové mechaniky

Přednáška č. 9

Verze 2024.1

Předchozí zkušenosti s řešením problémlů v x-reprezentaci

Pro problémy se **symetrickým potenciálem** musí být řešením **sudé nebo liché funkce**.

Obecný symetrický problém s po částech konstantním potenciálem lze řešit **navazováním**, tedy využitím podmínek **spojitosti vlnové funkce** a **spojitosti její derivace**.

Problém je představován diferenciální rovnicí s reálnými koeficienty $\Longrightarrow$ řešení můžeme zvolit reálné. **Reálné vlnové funkce** mají vždy **nulovou hustotu toku pravděpodobnosti**.

Problém **volné částice** má reálná i komplexní vlastní řešení, rovinné vlny i jejich reálné lineární kombinace. **Volná částice může být ve stacionárním stavu s nulovým i nenulovým tokem**!

Pro **částici omezenou v konečném prostoru** (∞ hluboká jáma), nelze komplexní vlnou současně splnit vlastní a okrajovou podmínku. Rovinná vlna není NIKDE nulová - vlastní stav **omezené částice** $\Longrightarrow$ **vždy nulový tok pravděpodobnosti.**

Význam rovinných vln

Uvažujme kladné p. Rovinná vlna představuje plně delokalizovaný stav (částice je všude)

$$\psi_p(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p}{\hbar}x - i\frac{E}{\hbar}t}.$$

Pohyb částice odpovídá postupu plochy konstantní fáze v čase, tedy je-li $E = pc$ (energie fotonu), pak konstantní fáze dává $x - ct = const. = x_0$ a tedy $x = x_0 + ct$ (pozor, pro foton je groupová a fázová rychlost stejná). **Vlna se šíří v kladném svěru osy x.**

Vlna $$\psi_{-|p|}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{|p|}{\hbar}x - i\frac{E}{\hbar}t}$$

se šíří v záporném směru osy x. Potvrzují to toky hustoty pravděpodobnosti, i vlastní hodnoty impulsu:

Toky (v 1D):

$$j = \frac{h}{m} Im\left\{\psi^*(q)\frac{\partial}{\partial q}\psi(q)\right\} = \frac{1}{m} Re\{\psi^*(q)\hat{p}\psi(q)\}$$

Odtud:

$$\int_{-\infty}^{\infty} j(q)\, dq = \frac{h}{m}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(q)\hat{p}\psi(q)\, dq = \frac{\langle\hat{p}\rangle}{m}$$

Pro rovinné vlny vychází $j = \frac{p}{m}\frac{1}{2\pi\hbar}$. Faktor nedává smysl, jde o artefakt normalizace na delta-funkci.

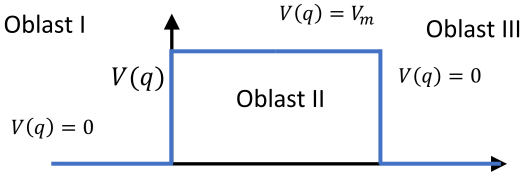
Výpočty je třeba provádět s konečným rozdělením impulsů

$$\psi(q) = \int_{-\infty}^{\infty} f(p)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}pq}\, dp, \text{ kde } \int |f(p)|^2 = 1$$

Rovinná vlna představuje stacionární **stav s nenulovou hustotou toku pravděpodobnosti**. Tok je konstantní, stav je stacionární.

Průchod potenciálovou bariéru

V neomezených problémech můžeme hledat **stacionární řešení s nenulovými toky** - takto lze vyšetřovat obecné problémy „rozptylu“. Např. částice přichází z nekonečna s danou hybností a „rozptyluje“ se na potenciálu.



Potenciál je po částech konstantní, řešení ve všech částech vypadají téměř stejně, kromě konstanty obsahující energii. Definujeme:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad k^2n^2 = \frac{2m(E - V_m)}{\hbar^2}$$

Schrödingerova rovnice pak vypadá jako standardní vlnová rovnice v optice s indexem lomu n. Derivaci $\frac{\partial}{\partial q}\psi$ značíme ψ'.

Máme tři řešení v oblastech I, II a III k navázání:

I.	$\psi_I'' + k^2\psi_I = 0,$	$x < 0,$	$V(x) = 0$
II.	$\psi_{II}'' + k^2n^2\psi_{II} = 0,$	$0 \leq x \leq L,$	$V(x) = V_m$
III.	$\psi_{III}'' + k^2\psi_{III} = 0,$	$x > L,$	$V(x) = 0$

Podmínky navazování na rozhraních v bodec $x = 0$ a $x = L$ jsou:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \qquad \psi_I'(0) = \psi_{II}'(0)$$
$$\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L) \qquad \psi_{II}'(L) = \psi_{III}'(L) \qquad (*)$$

Obecné řešení bychom hledali ve tvaru:

$$\psi_I(x) = Ae^{ikx} + B^{-ikx} \qquad \psi_{III}(x) = ae^{ikx} + b^{-ikx}$$

$$\psi_{II}(x) = \alpha e^{iknx} + \beta^{-iknx}$$

Vlna přicházející z $-\infty$

Odražená vlna

Prošlá vlna

Vlna přicházející z ∞

Nastavíme $b = 0$ (nic nepřichází zprava) a $A = 1$ (vše bude relativní k intenzitě vlny přicházející z $-\infty$).

Rovnice (*) jsou 4 rovnice pro 4 neznámé. Zajímá nás pouze B a a. Definujeme **koeficient odrazu**

Toky odpovídající nalétávající, odražené a prošlé vlně

$$R = \frac{J_B}{J_A} = |B|^2, \text{ kde } J_A = \frac{\hbar k}{m}|A|^2 \text{ a } J_B = \frac{\hbar k}{m}|B|^2$$

a **koeficient propustnosti**

$$D = \frac{J_a}{J_A} = |a|^2, \text{ kde } J_a = \frac{\hbar k}{m}|a|^2$$

Z rovnice kontinuity: $\boldsymbol{R + D = 1}$. Pro $\boldsymbol{E > V_m} \Longrightarrow n$ je reálné

Řešení dává $D < 1$ a $R > 0$ v rozporu s klasickým výsledkem.

Pro $\boldsymbol{E < V_m} \Longrightarrow n$ je ryze imaginární: $n = in' = i\sqrt{\frac{V_m - E}{E}}$

potom přibližně: $$D = \frac{16n^2}{(1+n^2)^2} e^{-2knL} = \frac{16n^2}{(1+n^2)^2} e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(V_m - E)}\, L}$$

Pro obecný, ne příliš rychle se měnící val $V(x)$ můžeme psát

$$\boxed{D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(V(x) - E)}\, dx}}$$

Shrnutí:

Klasicky platí: $E > V_m \Longrightarrow D = 1, R = 0$

$: E < V_m \Longrightarrow D = 0, R = 1$

Kvantově v obou případech platí: $0 < D < 1$ a $0 < R < 1$

Pro $E > V_m$ může být i $V_m < 0$ (potenciálová jáma). Tedy - **částice se může odrazit od potenciálové jámy**. Průchodu částice potenciálním valem pro $E < V_m$ říkáme **tunelový jev**.

Zdroje:

Přednáška UKM z roku 2021: https://www.mancal.cz/teaching/introduction-to-quantum-theory-lecture/

- *Pro tento problém zatím videa neexistují.*

Příště: **Pohyb ve sféricky symetrickém potenciálu**