Fyzika pro chemiky II

Souhrn základních problémů a řešení Schrödingerovy rovnice v jednorozměrném případě $\Psi = \Psi(x,t)$

Petr Mikulík

Ústav fyziky kondenzovaných látek
Přírodovědecká fakulta
Masarykova univerzita, Brno

Částice v silovém poli s potenciálem U(x): řešíme Schrödingerovu rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+U(x)\Psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$

$\Psi(x,t)$ i její derivace musí být spojité + normalizace + okrajové a počáteční podmínky $\Psi(x,t=0)$

Řešíme separací proměnných: $\Psi(x,t)=\psi(x)\phi(t)$

Časová závislost: $i\hbar\frac{d\phi(t)}{dt}=E\phi(t) \quad \Rightarrow \quad \boxed{\phi(t)=Ae^{-iEt/\hbar}}$

Prostorová závislost: $\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)\psi(x)=E\psi(x)}$

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+U(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)}$$

Volná částice, potenciál U(x)=0, E_{kin} = const: řešíme Schrödingerovu rovnici

Separací proměnných: $\Psi(x,t) = \psi(x)\phi(t)$

$$i\hbar \frac{d\phi(t)}{dt} = E\,\phi(t) \qquad \Rightarrow \qquad \phi(t) = A\,e^{-iEt/\hbar}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\,\psi(x) \quad \Rightarrow \quad \psi(x) = e^{i\sqrt{2mE}\,x/\hbar}$$

Řešení zapíšeme ve tvaru vlnové funkce:

$$\Psi_k(x,t) = A\,e^{-i(\omega t - kx)} = A\,e^{-i(Et/\hbar - px/\hbar)}$$

což je postupná monochromatická vlna s vlnovým vektorem ***k*** (kvantové číslo)

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \qquad \omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

a normalizací

$$\int_a^b dx\,\left|\Psi_k(x,t)\right|^2 = |A|^2(b-a) = 1$$

Volná částice, potenciál U(x)=U, E_{kin} = const > U: řešíme Schrödingerovu rovnici

Rovnice je:

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

Řešení je tedy jako u volné částice s energií *(E–U)*:

$$\Psi_k(x,t)=Ae^{-i(\omega t-kx)}=Ae^{-i((E-U)t/\hbar-px/\hbar)}$$

což je postupná monochromatická vlna s vlnovým vektorem ***k*** (kvantové číslo)

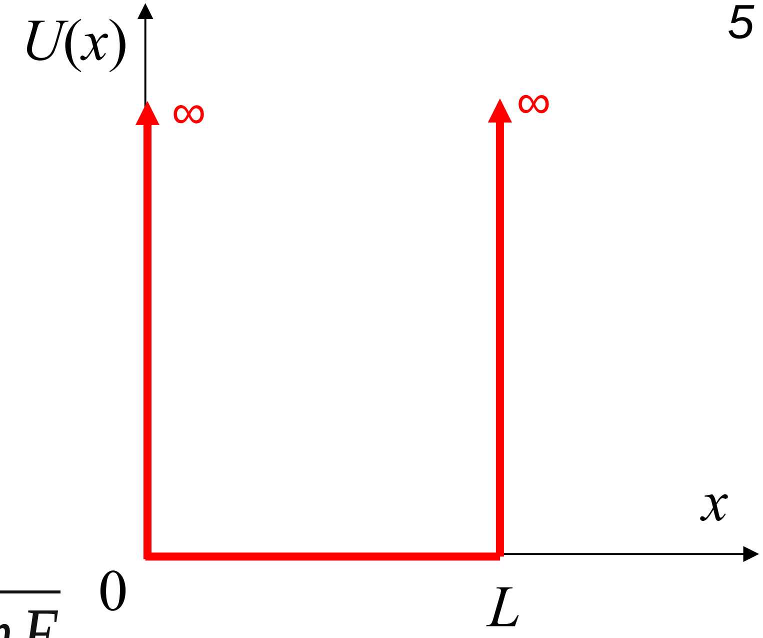
$$E=U+\frac{p^2}{2m}=U+\frac{\hbar^2k^2}{2m}, \qquad \omega=\frac{E-U}{\hbar}=\frac{\hbar k^2}{2m}$$

a normalizací

$$\int_a^b dx\,|\Psi_k(x,t)|^2=|A|^2(b-a)=1$$

Jednorozměrná nekonečně hluboká kvantová jáma

Předpokládejme profil potenciální energie:



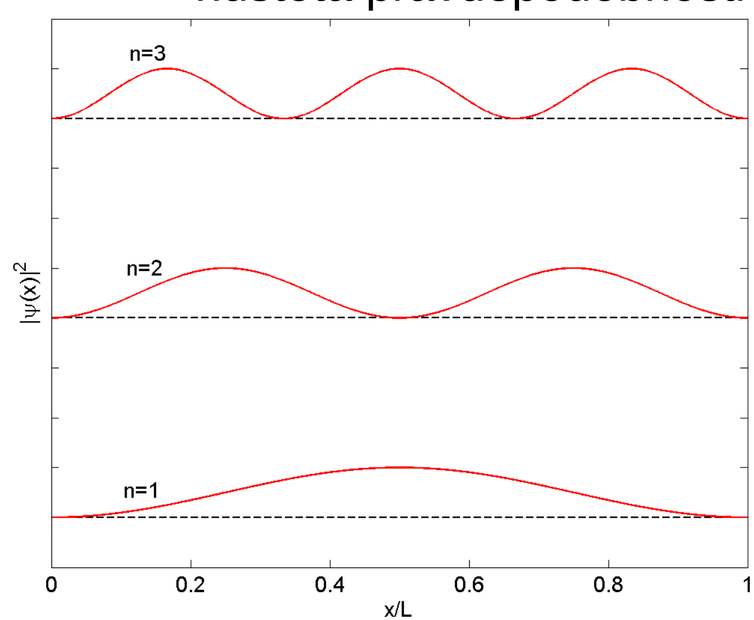
Vně jámy: $\psi(x) = 0$

Uvnitř jámy: $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$

Řešení předpokládáme:

$$\psi_k(x) = A_k \sin(kx) \qquad \text{pro } x \in \langle 0, L \rangle, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

hustota pravděpodobnosti



a vyjde

$$k_n = n\pi/L, \quad n = 1,\ 2,\ \dots$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = E_0 n^2$$

Obecné řešení:

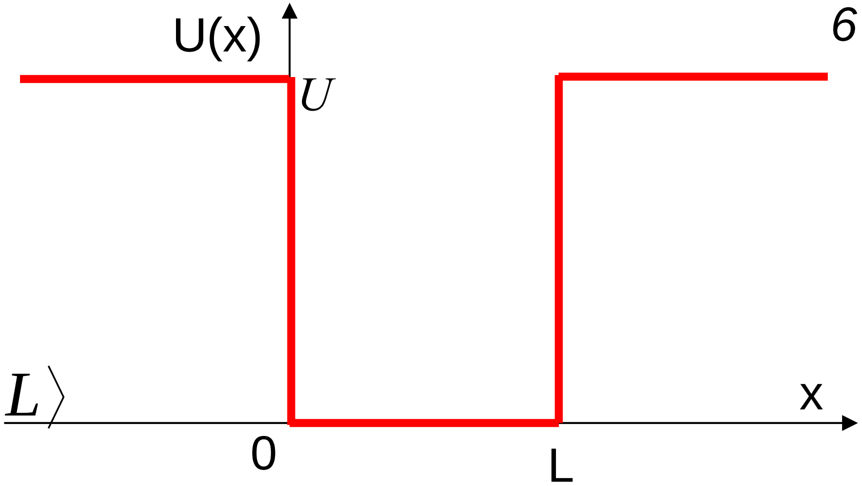
$$\psi(x) = \sum_n \psi_{k_n}(x) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin(k_n x)$$

$$|\psi\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} A_n |n\rangle$$

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$$

souřadnicová vs formální reprezentace

Jednorozměrná konečně hluboká kvantová jáma



Vně jámy: $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi\,, \quad x \in \langle 0, L\rangle$$

Uvnitř jámy: $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = (E-U)\psi\,, \quad x \notin \langle 0, L\rangle$$

Částice vázaná v jámě: $E < U$

$$\psi(x) = C e^{\alpha x} \quad \text{pro} \quad x<0, \quad \psi(x) = D e^{-\alpha x} \quad \text{pro} \quad x>L, \quad \alpha = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}$$

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx) \quad \text{pro} \quad x \in \langle 0, L\rangle$$

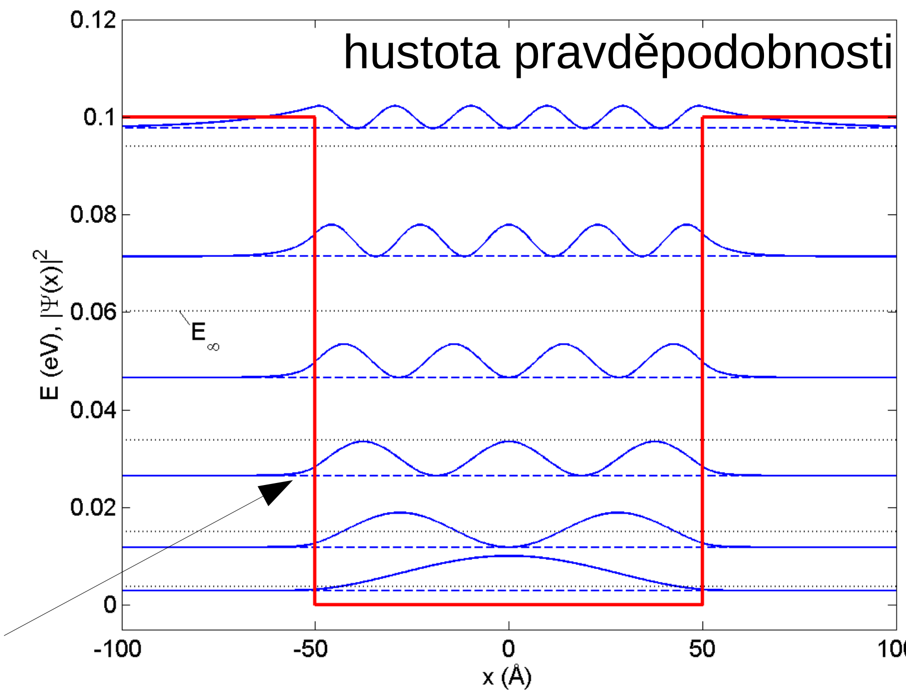
a vyjde

$$\tan(kL) = \frac{2\alpha k}{k^2-\alpha^2} \quad \rightarrow \quad k_n, \; E_n$$

Obecné řešení:

$$\psi(x) = \sum_n \psi_{k_n}(x)$$

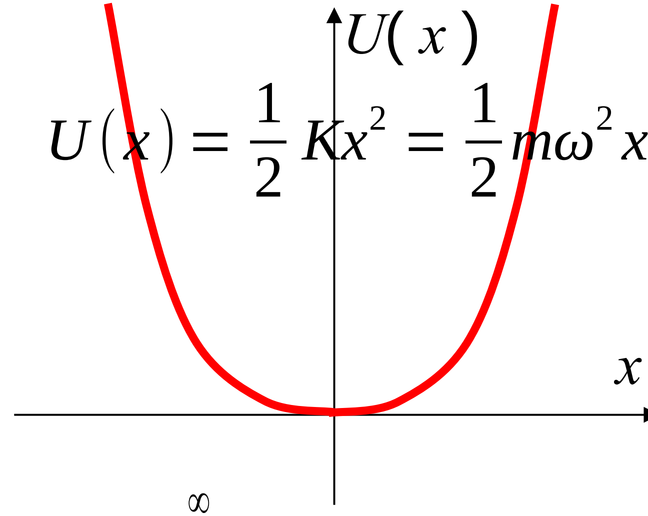
$$\delta = \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U-E)}}$$



Jednorozměrný kvantový harmonický oscilátor: parabolický potenciál U(x)

Kdekoliv: $$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - E\right)\psi(x)$$

$$U(x) = \frac{1}{2}Kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$



Vyjde

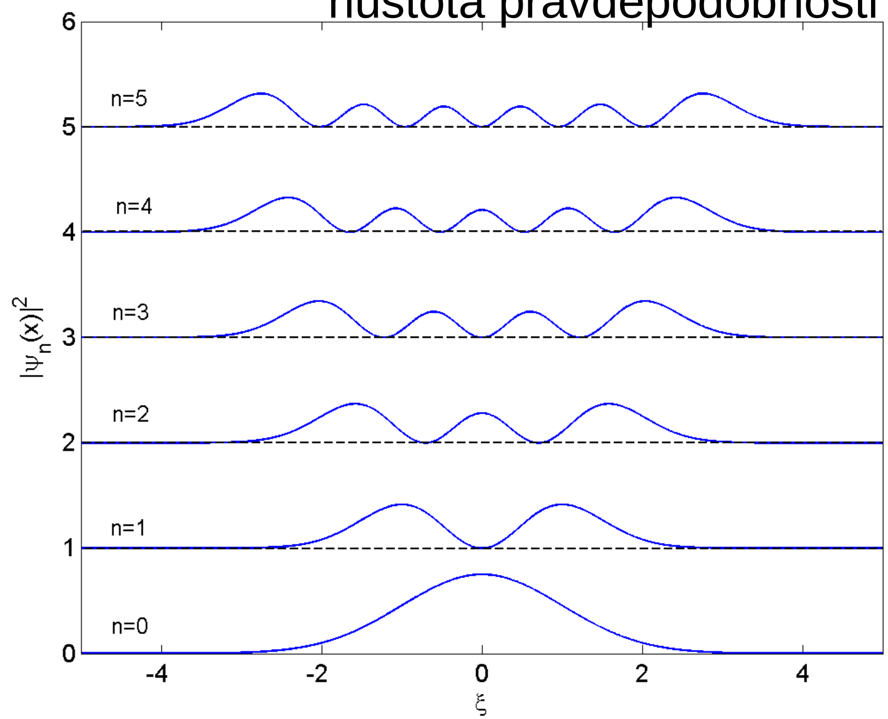
$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!\,2^n\sqrt{\pi}}}\, e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi), \qquad \xi = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

kde Hermiteovy polynomy $$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\xi^2}\right)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\; \psi_n(\xi)\psi_m(\xi) = \delta_{nm}$$

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

hustota pravděpodobnosti

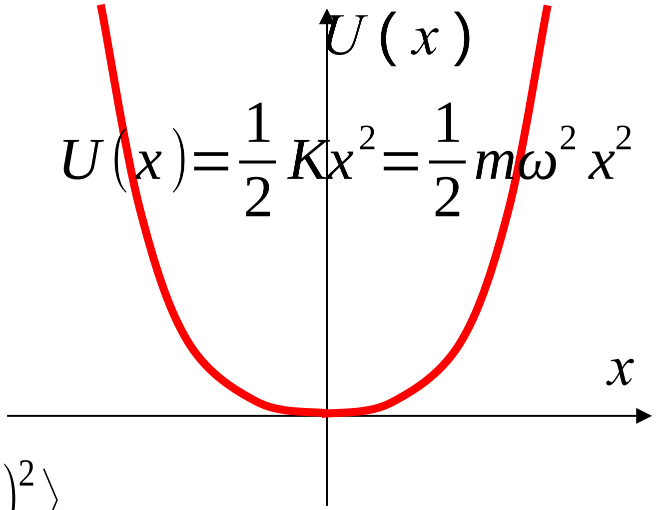


Obecné řešení: $$\psi(x) = \sum_n \psi_n(x)$$

Základní stav pro $n = 0$:

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega, \quad \psi_0(\xi) = \pi^{-1/4} e^{-\xi^2/2}$$

Jednorozměrný kvantový harmonický oscilátor: parabolický potenciál U(x)



$$U(x) = \frac{1}{2} K x^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

Heisenbergův princip neurčitosti a současně měřitelné veličiny:

$$\Delta x \, \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \qquad \ldots$$

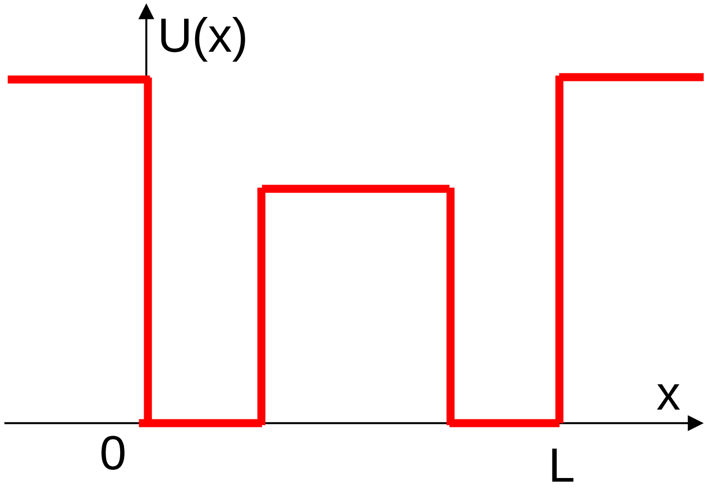
Správněji $\quad \langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p_x)^2 \rangle \geq \dfrac{\hbar^2}{4}$ $\quad$ kde $\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$

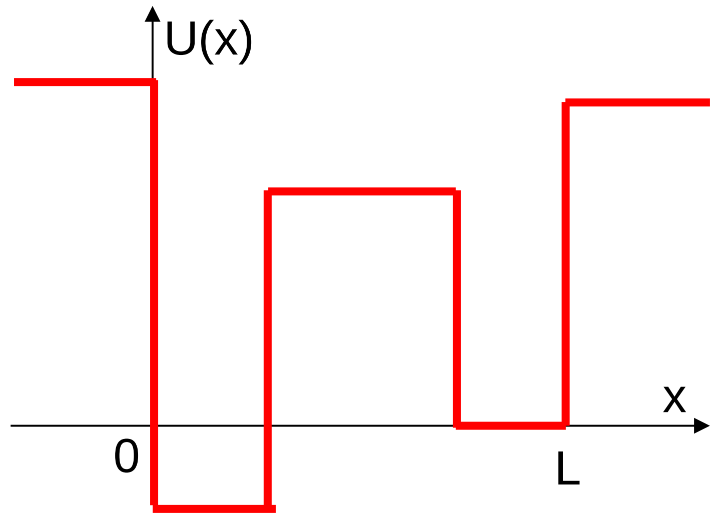
Minimalizujeme *H* a vyjde základní stav:

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

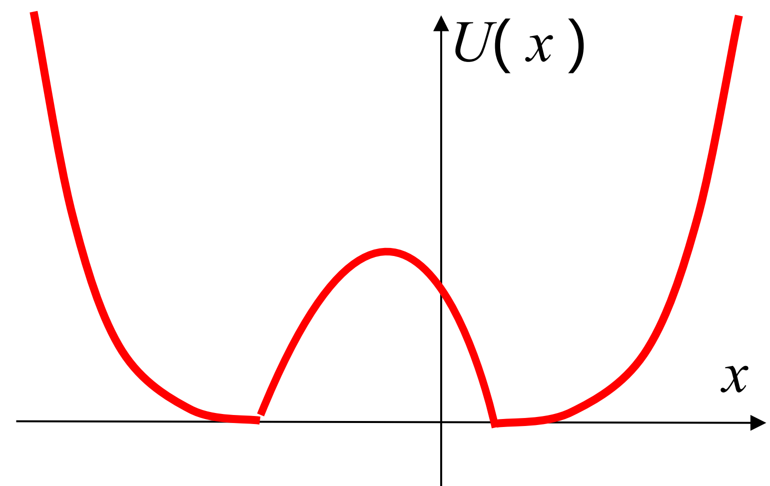
Jednorozměrná potenciálová jáma: $U(x \to \pm\infty) = \infty$ a $U(x \to \pm\infty) = const$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi \qquad \text{nebo} \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = (E - U(x))\psi$$

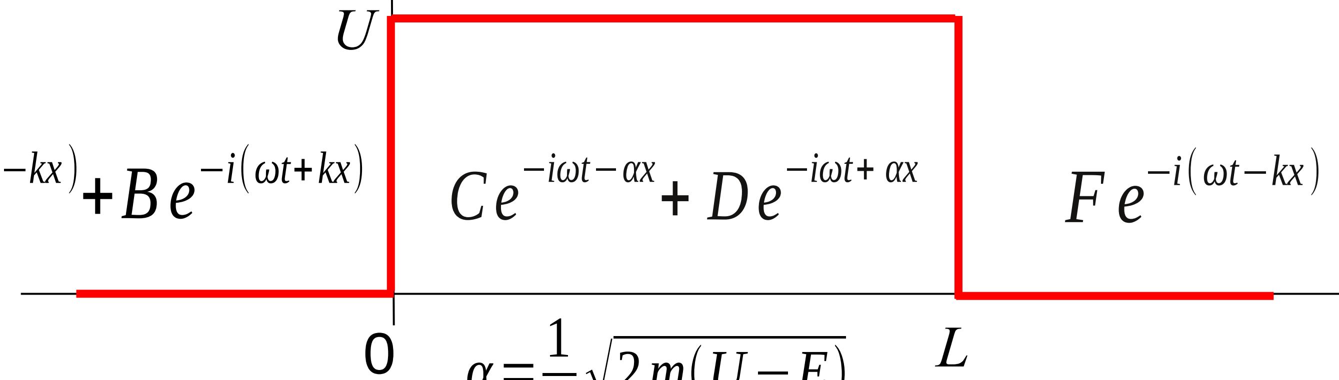




Obecné řešení: $\psi(x) = \sum_n \psi_n(x)$

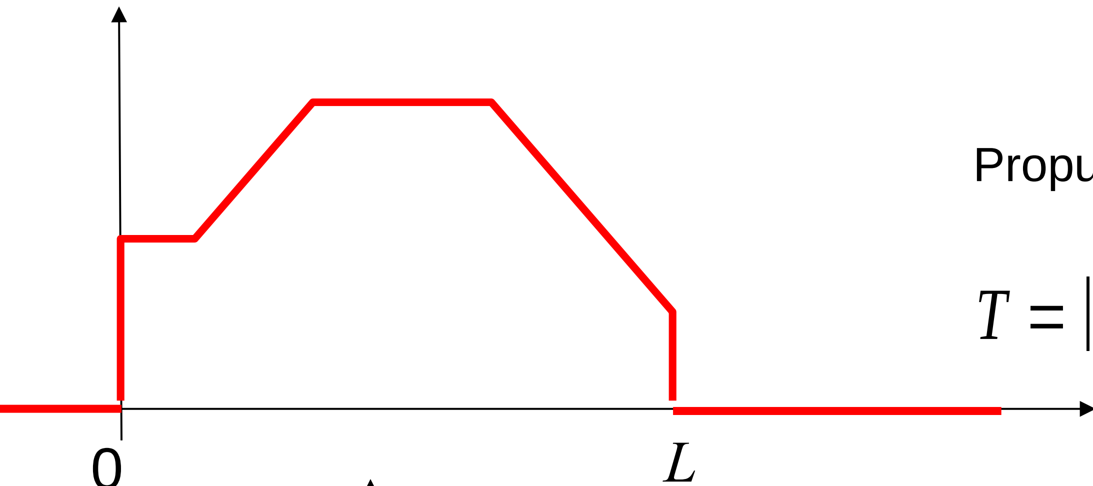


V základním stavu nemůže být $E_0 = 0$, odporovalo by to Heisenbergovu principu neurčitosti.
Java aplet „Double well“: http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/en/pages/p0204.html
Aplet 1D Quantum States: http://www.falstad.com/qm1d/



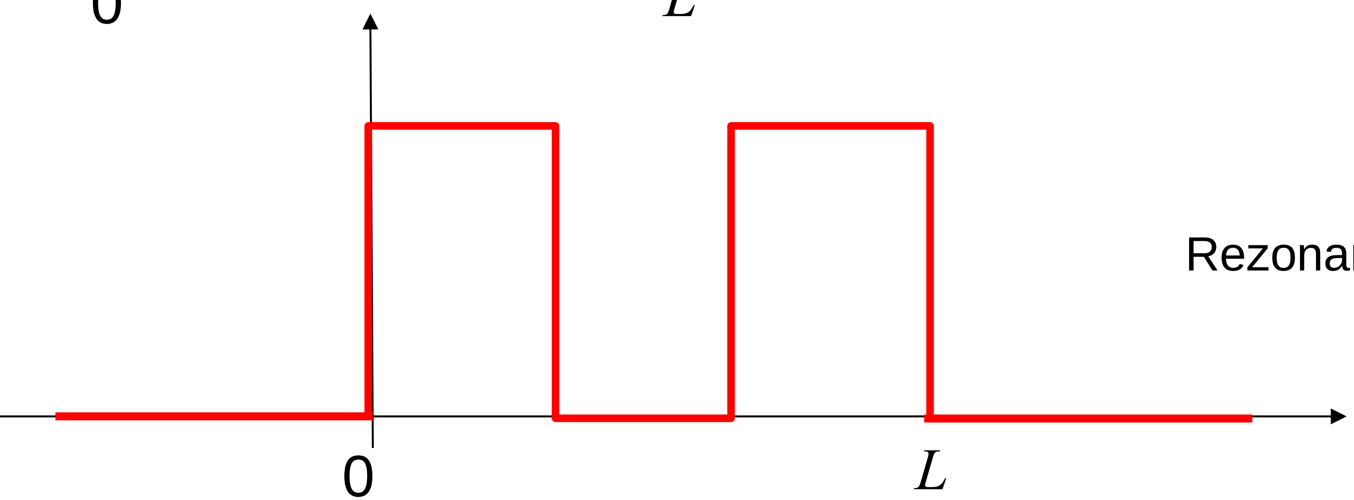
$$\Psi(x,t) = A e^{-i(\omega t - kx)} + B e^{-i(\omega t + kx)} \qquad C e^{-i\omega t - \alpha x} + D e^{-i\omega t + \alpha x} \qquad F e^{-i(\omega t - kx)}$$

$$\alpha = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}$$



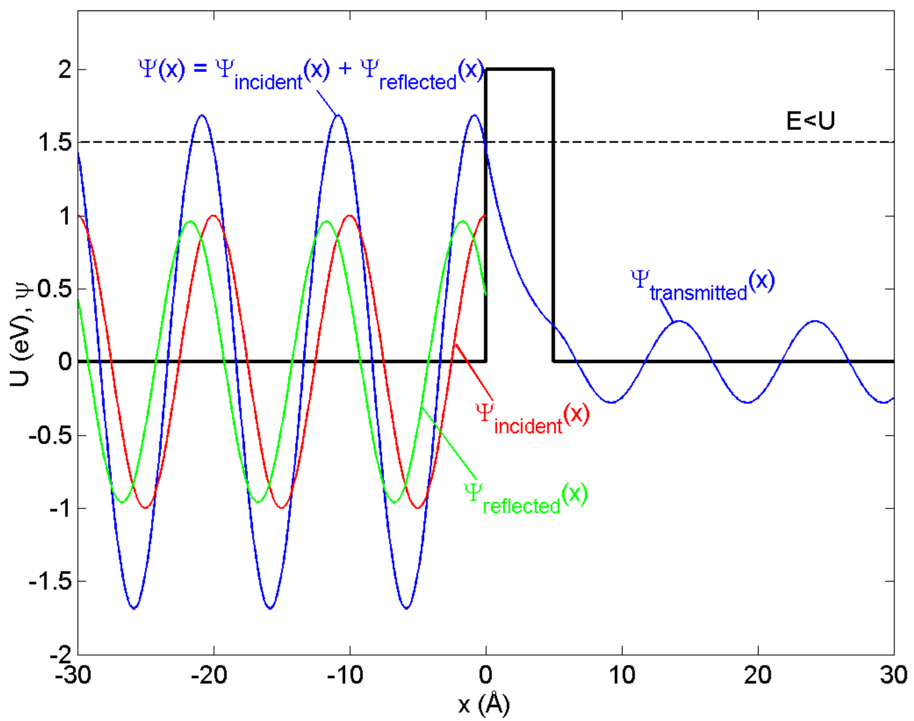
Propustnost pro libovolný tvar bariéry:

$$T = |F/A|^2 \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m}\int_{U(x)>E} dx\sqrt{U(x)-E}\right)$$



Rezonance, virtuální a metastabilní hladiny

Příklad výpočtu pro $E < U$:



Příklad výpočtu pro $E > U$: