

Úvod do fyziky mikrosvěta

Část 2

Vlnová klubka

Heisenbergův princip neurčitosti

Schrödingerova rovnice v jednorozměrném prostoru

Vlnová klubka

Pohybující se **lokalizovaná částice** nemůže být popsána postupnou monochromatickou vlnou. Lokalizaci získáme superpozicí mnoha postupných vln s různými frekvencemi

Monochromatická postupná vlna:

$$\Psi(x, t) = A e^{-i(\omega t - kx)} \quad (\text{II.22})$$

Vlnové klubko:

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) e^{-i(\omega(k)t - kx)} \quad (\text{II.23})$$

Disperze: $\omega = \omega(k)$

Fázová rychlost:

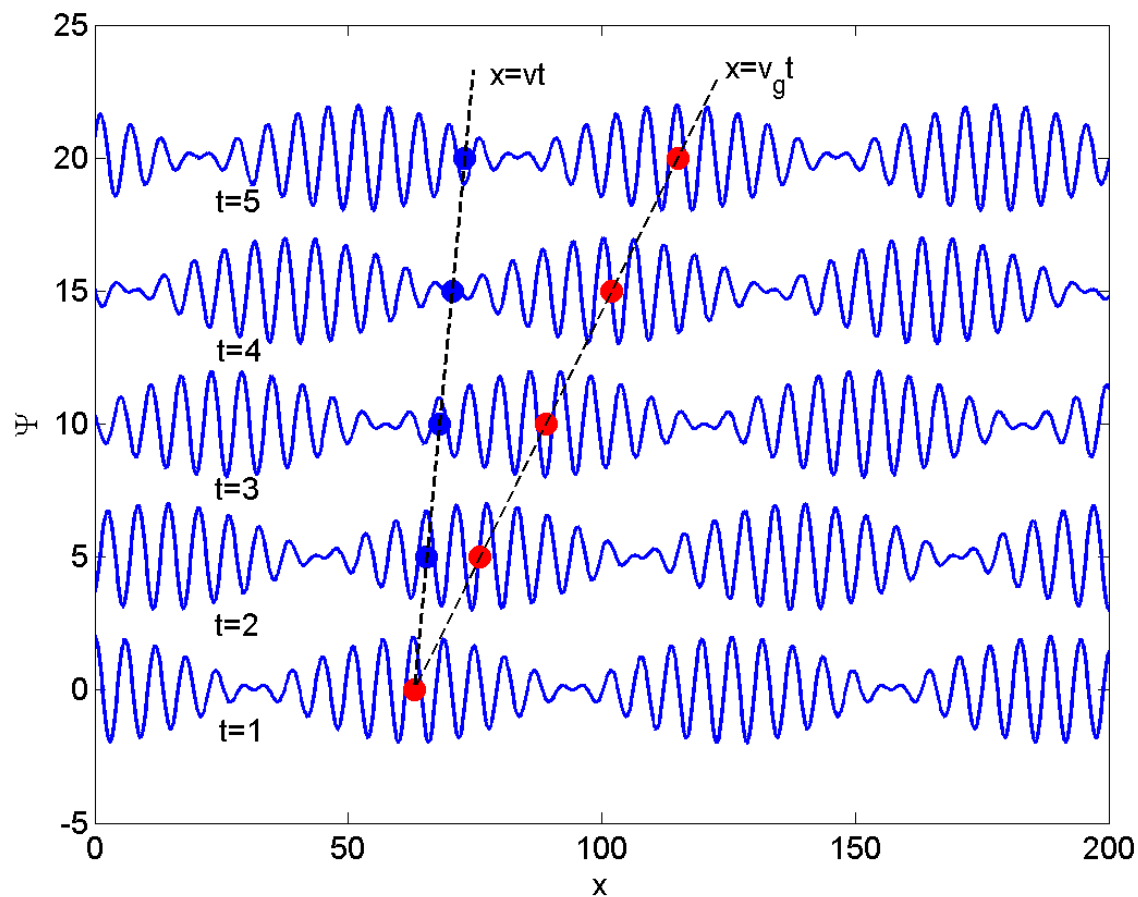
$$v(k_0) = \frac{\omega(k_0)}{k_0}$$

Grupová rychlost:

$$v_g(k_0) = \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k=k_0} \quad (\text{II.24})$$

Superpozice dvou monochromatických postupných vln s týmiž amplitudami, s vlnovými vektory $k_1=1$, $k_2=1.1$ a fázovými rychlostmi $V_1=2$ a $V_2=3$ (v libovolných jednotkách). Výsledné vlnové klubko má **fázovou** a **grupovou rychlost**

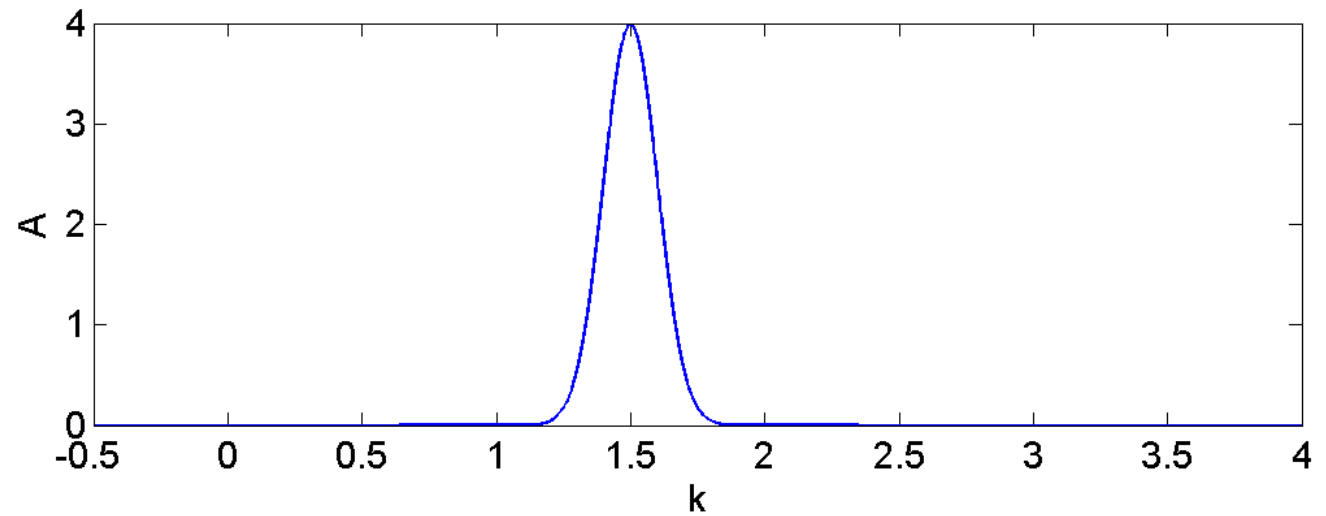
$$v \approx \frac{v_1 + v_2}{2} = 2.5, \quad v_g = v + k \frac{dv}{dk} \approx \frac{v_1 + v_2}{2} + \frac{k_1 + k_2}{2} \frac{v_2 - v_1}{k_2 - k_1} = 13$$



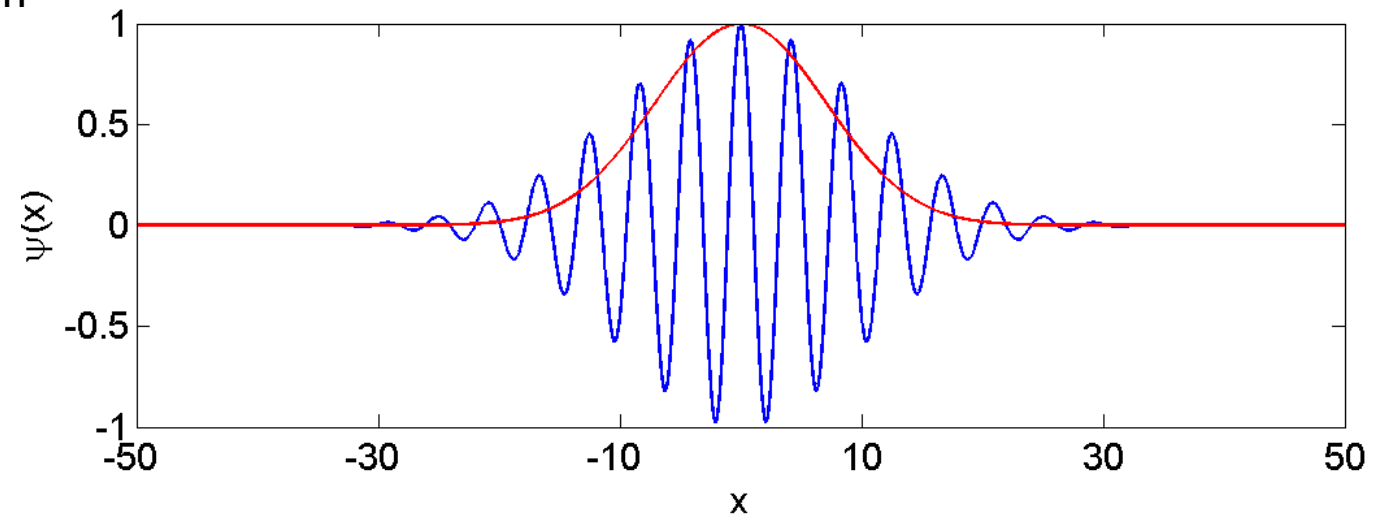
Fáze se posouvá rychlostí V , maximum amplitudy klubka se posouvá rychlostí V_g .

Vlnové klubko složené z mnoha monochromatických vln

Závislost amplitudy na vlnovém vektoru:

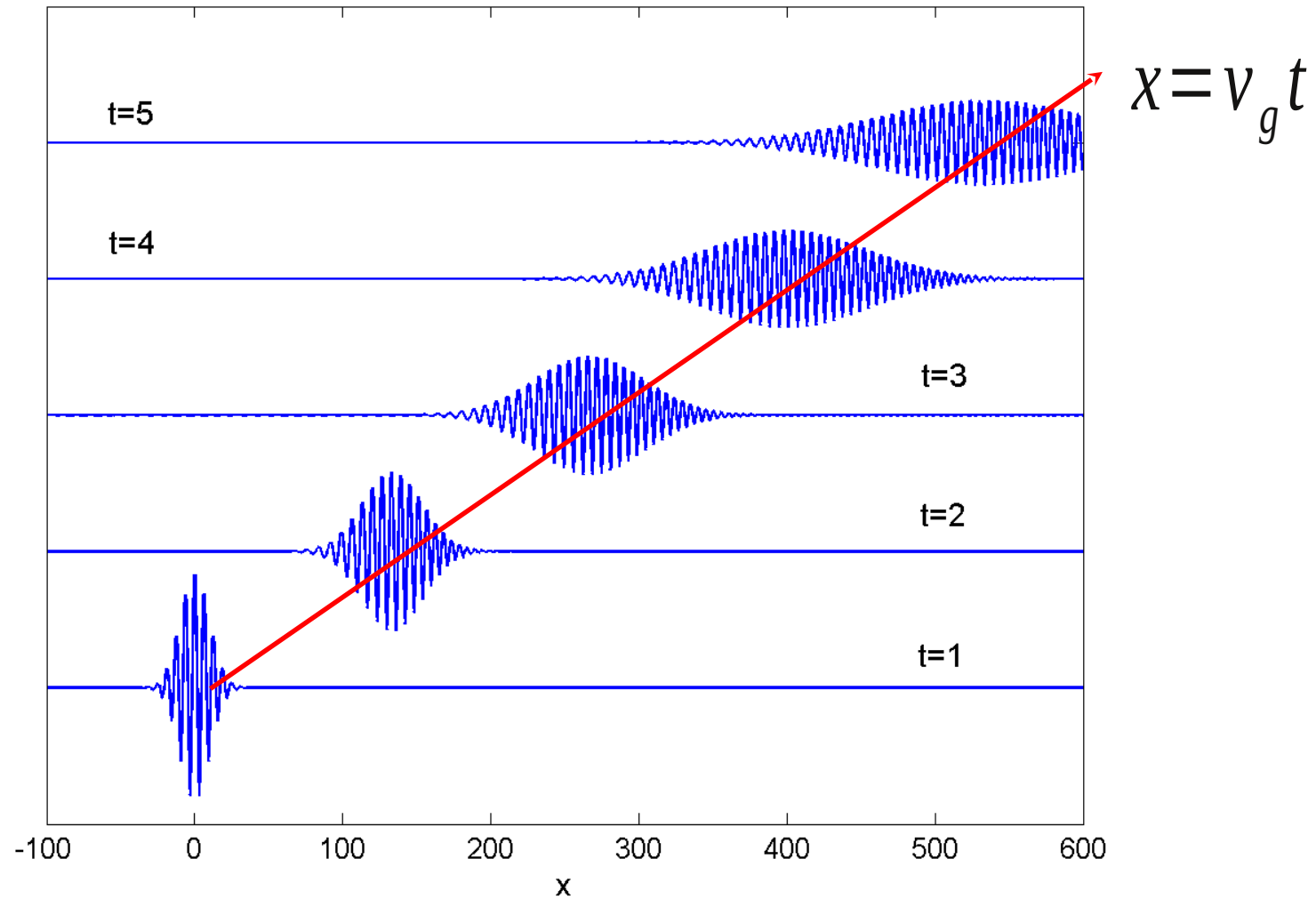


→ rozložení výchylky v daném časovém okamžiku:



Časový vývoj tvaru vlnového klubka při nenulové disperzi (libovolné jednotky):

$$\frac{dv}{dk} = \frac{1}{k} \left(\frac{d\omega}{dk} - \frac{\omega}{k} \right) > 0$$



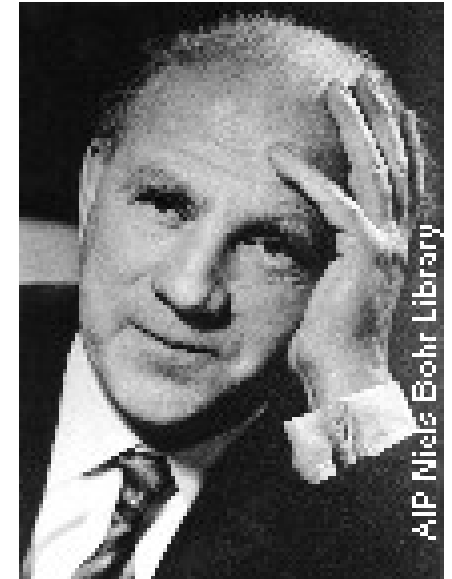
Heisenbergův princip neurčitosti (1924)

Šířka vlnového klubku v prostoru je nepřímo úměrná šířce oboru vlnových vektorů zastoupených ve vlnovém klubku:

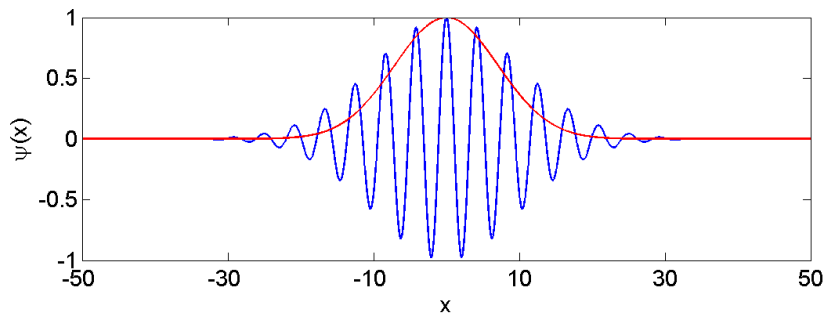
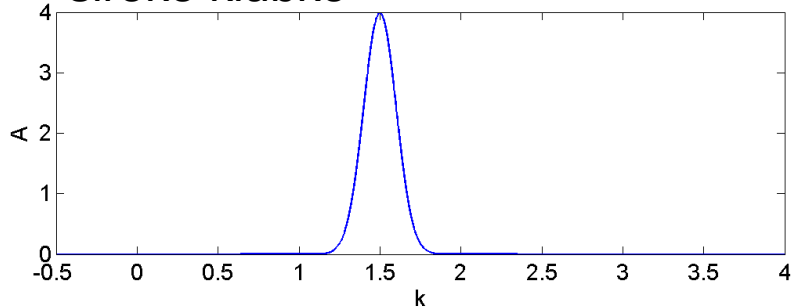
$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}$$

Což můžeme vyjádřit vztahem pro hybnosti:

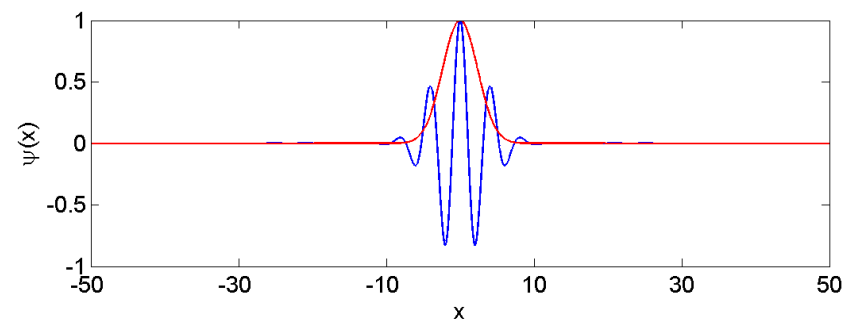
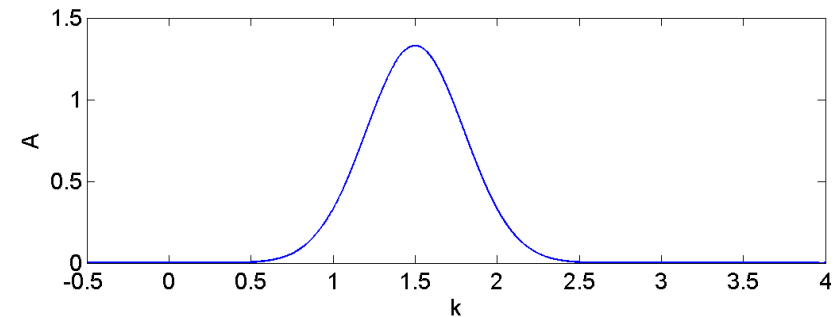
$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (\text{II.25})$$



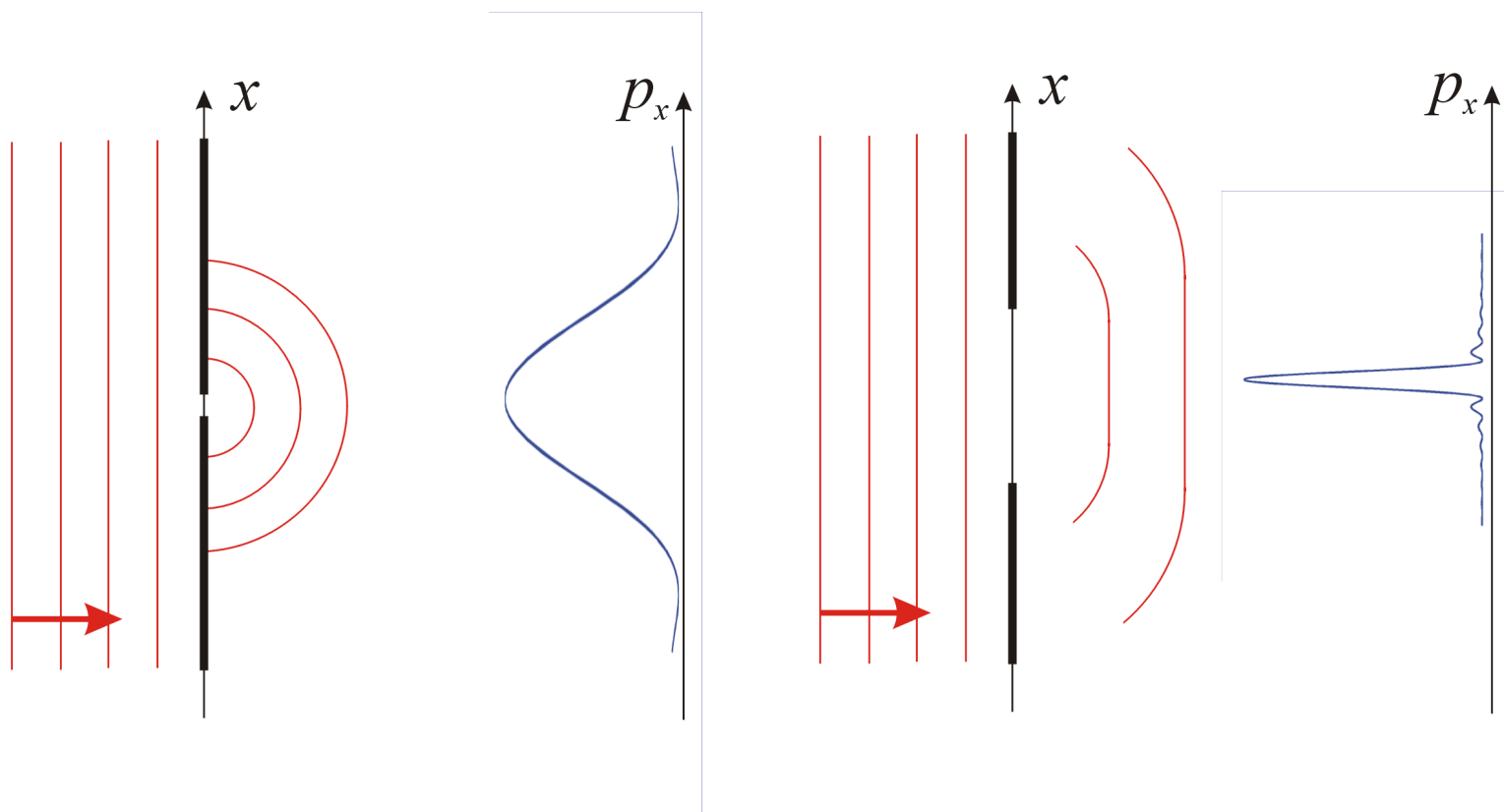
široké klubko



úzké klubko



Heisenbergův princip neurčitosti lze ilustrovat (Fraunhoferovou) difrakcí světla na štěrbině:

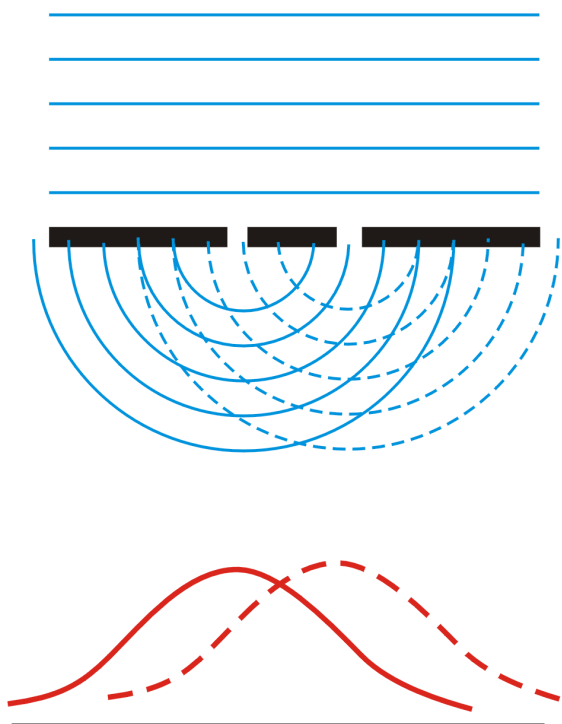


úzká štěrbiná – malé Δx , velké Δp_x

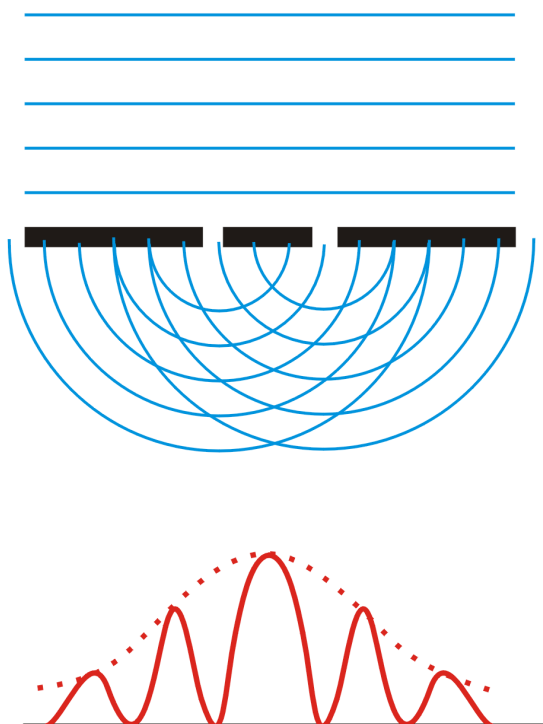
široká štěrbiná – velké Δx , malé Δp_x

Difrakci částic můžeme popsat jako difrakci de Broglieho vln

jen jeden otvor otevřen

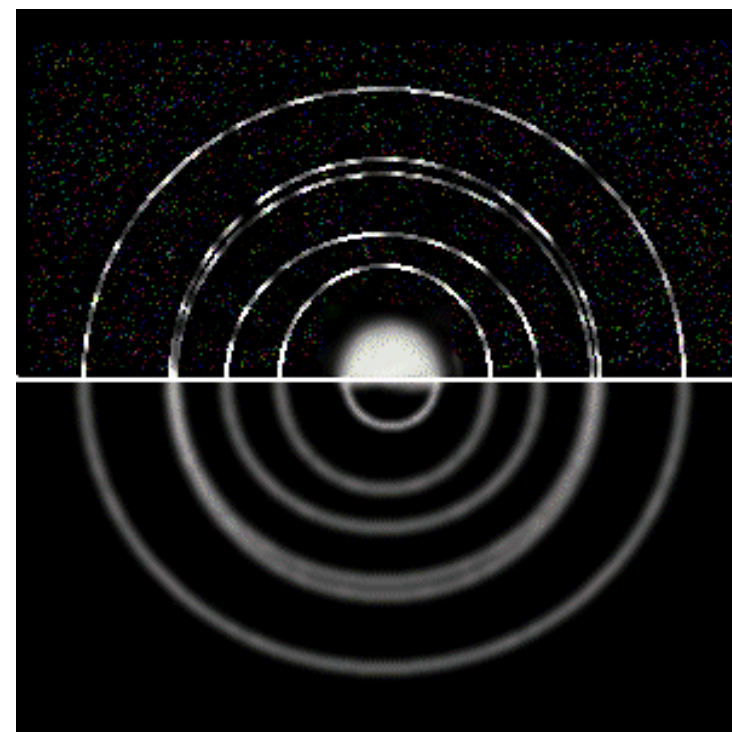


oba otvory otevřeny
současně



Experimentální ověření:

rtg difrakce na kovové folii ...



... a difrakce elektronů na téže kovové folii, tatáž vlnová délka

II.4. Základy kvantové mechaniky v 1 dimenzi

Vlnová funkce $\Psi(x, t)$ nese všechny informace o objektu. Praviděpodobnost nalezení částice v elementárním intervalu dx je

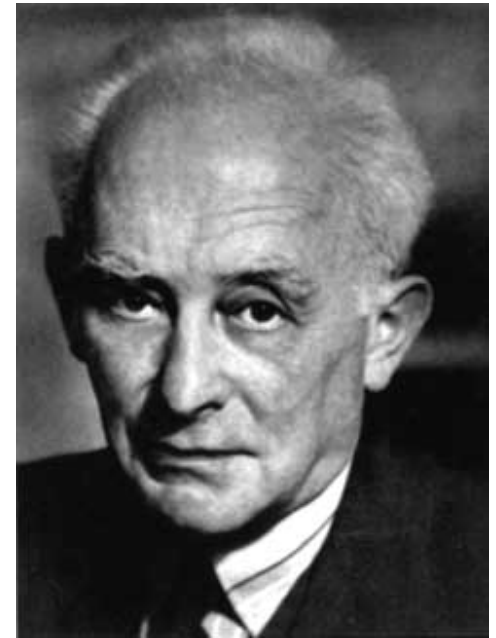
$$P(x, t) dx = |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (\text{II.26})$$

$P(x, t)$ je **hustota pravděpodobnosti** nalezení částice v místě x . Je jisté, že se částice nachází někde na ose x , proto

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x, t)|^2 = 1 \quad (\text{II.27})$$

... **normovací podmínka** pro vlnovou funkci.

Srovnání s klasickou fyzikou: v klasické fyzice známe přesnou polohu částice v libovolném čase $x=x(t)$, a pravděpodobnost je tedy rovna jedné v místě, kde se částice nachází, a nula všude jinde, tedy $\Psi_{klas}(x=x(t), t)=1$ a $\Psi_{klas}(x \neq x(t), t)=0$



Max Born (1882–1970)

Vlnová funkce volné částice

Na volnou částici nepůsobí žádná síla a její kinetická energie E je konstantní. Z de Broglieho vztahu $p = \hbar k$ (II.18) mezi hybností p a vlnočtem k plyne

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (\text{II.28})$$

Vlnová funkce

$$\Psi_k(x, t) = A e^{-i(\omega t - kx)} = A e^{-i(Et/\hbar - px/\hbar)} = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} \quad (\text{II.29})$$

je postupná monochromatická vlna.

Stav částice je úplně určen vlnovým vektorem k (**kvantové číslo**).

Normalizace funkce (aneb upřesnění konstanty A): částice se určitě nachází v intervalu $\langle a, b \rangle$ a proto integrál musí vyjít roven jedné (100procentní pravděpodobnost):

$$\int_a^b dx |\Psi_k(x, t)|^2 = |A|^2 (b - a) = 1 \quad (\text{II.30})$$

a hodnota A v (II.29) je tedy

$$A = \frac{1}{\sqrt{b - a}}$$

Částice v silovém poli

Schrödingerova rovnice – jeden z postulátů kvantové mechaniky:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \quad (\text{II.31})$$

Tato rovnice popisuje časový vývoj vlnové funkce částice v silovém poli s **potenciální energií $U(\mathbf{x})$** . Počáteční podmínka je dána funkcí

$$\Psi(x, t=0)$$

Řešme rovnici separací proměnných. Předpokládejme

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t)$$



Erwin Schrödinger
(1887–1961)

Částice v silovém poli

Schrödingerova rovnice – jeden z postulátů kvantové mechaniky

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x) \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \quad (\text{II.31})$$

rovnice popisuje časový vývoj vlnové funkce částice v silovém poli s **potenciální energií $U(\mathbf{x})$** . Počáteční podmínka je dána funkcí

$$\Psi(x, t=0)$$

Řešme rovnici separací proměnných. Předpokládejme

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \phi(t)$$

Dosazením vyjde

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

$$i\hbar \frac{d\phi(t)}{dt} = E \phi(t) \Rightarrow \phi(t) = A e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \quad (\text{II.31})$$

časově nezávislá Schrödingerova rovnice



Erwin Schrödinger
(1887–1961)

Jednorozměrná nekonečně hluboká kvantová jáma

Předpokládejme profil potenciální energie $U(x)$ jako nekonečně hlubokou jámu (propast), částice s energií E se nachází uvnitř.

Řešíme Schrödingerovu rovnici (II.31) a hledáme řešení, tj. E a $\psi(x)$ v diferenciální rovnici:

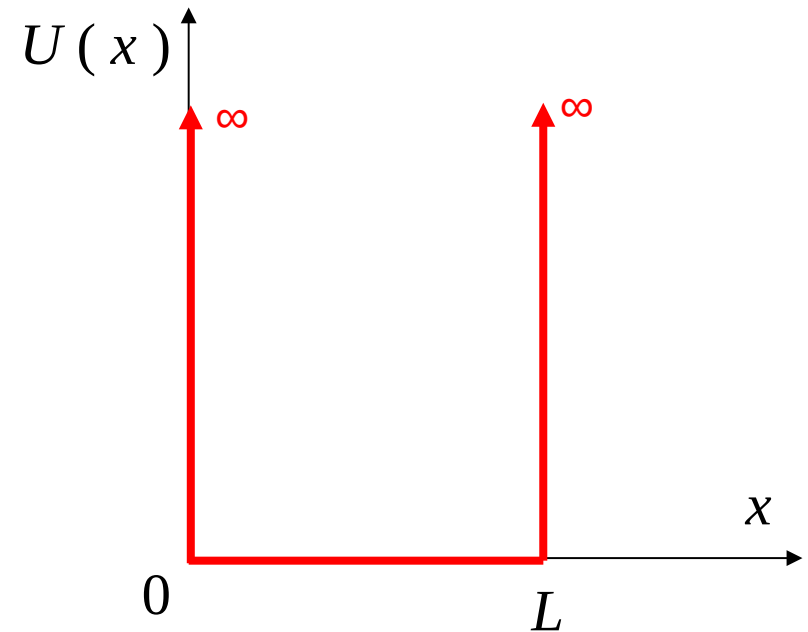
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + U(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

Částice se určitě nachází uvnitř jámy, mimo jámu se určitě nenachází, tj.

$$\psi(x) = 0 \quad \text{vně jámy}$$

Uvnitř jámy je $U=0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = E \psi \quad (\text{II.32})$$



Obecné řešení – číslujeme je písmenkem (číslem) k :

$$\psi_k(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx), \quad x \in \langle 0, L \rangle, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (\text{II.33})$$

Vlnová funkce $\psi(x)$ musí být všude spojitá, její derivace $d\psi/dx$ musí být všude spojitá s výjimkou bodů, v nichž je $U(x) \rightarrow \infty$. Platí proto

$$\psi_k(0) = \psi_k(L) = 0 \quad (\text{II.34})$$

Řešíme rovnici (II.32) s okrajovými podmínkami (II.34) – okrajový problém.

Z podmínky (II.34) plyne $A = 0$ a možné hodnoty kvantového čísla k jsou pouze tyto:

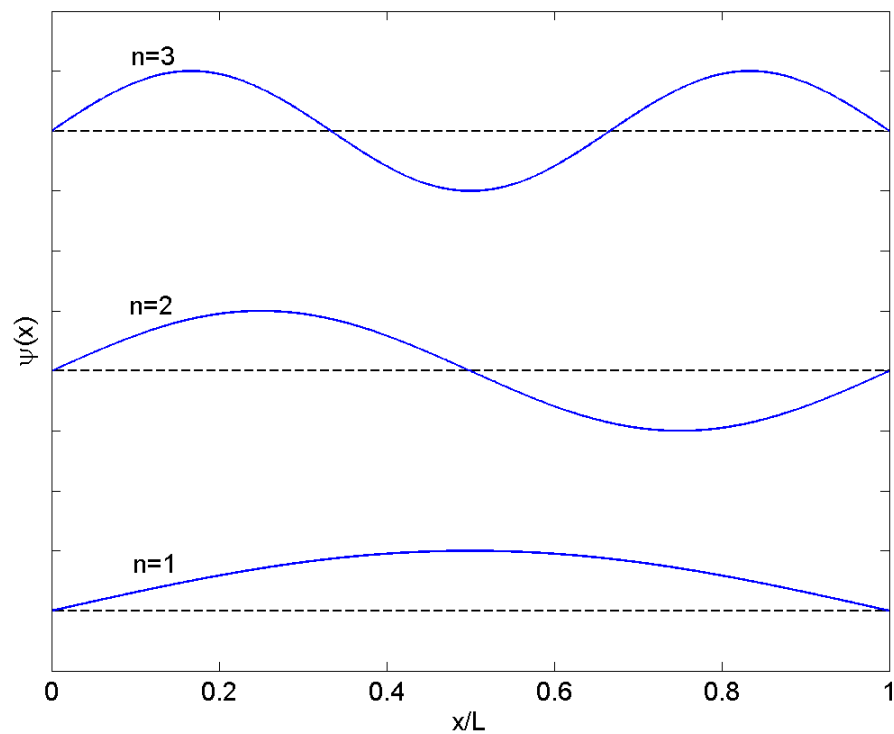
$$k = n\pi/L, \quad n=1,2,\dots \quad (\text{II.35})$$

Energie částice v potenciálové jámě jsou **kvantovány**

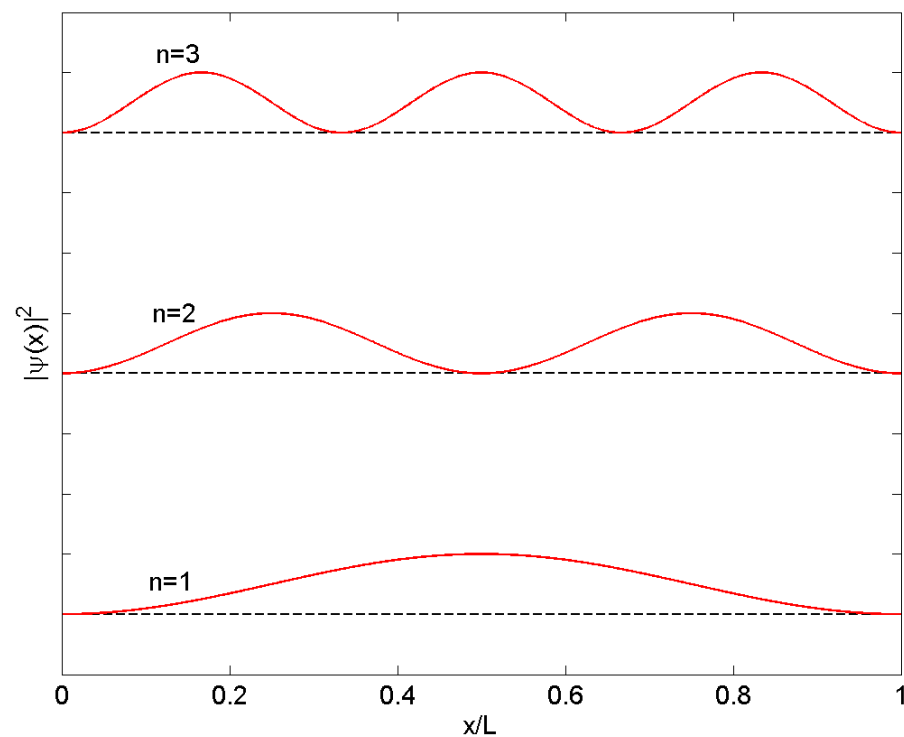
$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \propto n^2, \quad n=1,2,\dots \quad (\text{II.36})$$

Obecné řešení rovnice (II.32) je lineární kombinace řešení (II.33) s různými hodnotami **kvantového čísla** n .

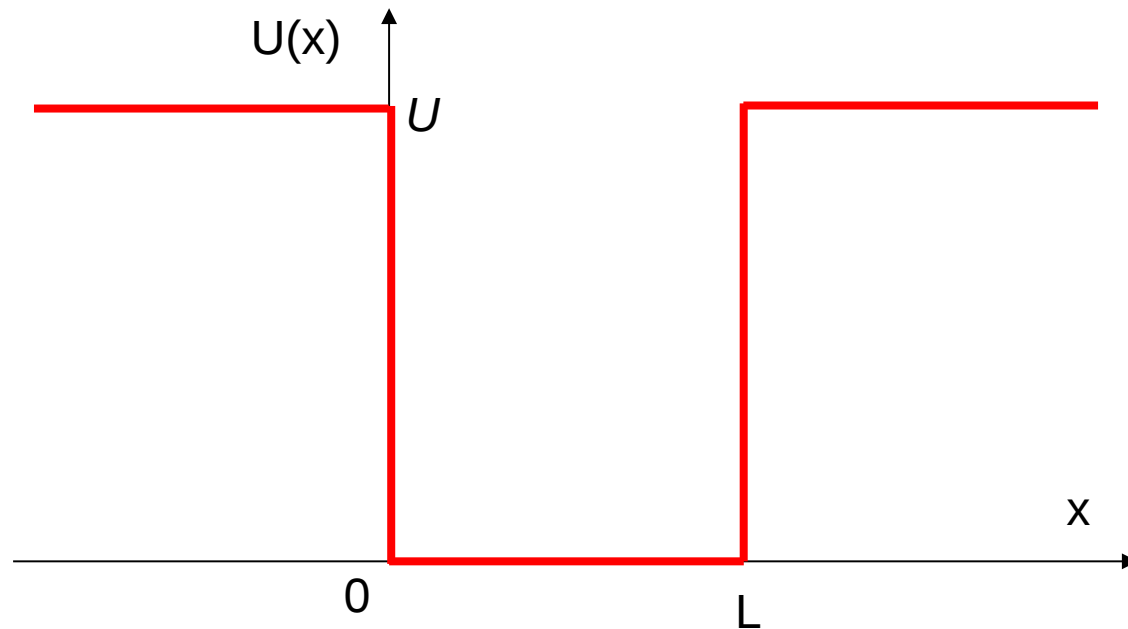
vlnová funkce $\psi(x)$



hustota pravděpodobnosti $P(x) = |\psi(x)|^2$



Jednorozměrná konečně hluboká kvantová jáma



Schrödingerova rovnice částice uvnitř jámy vypadá stejně jako na dně nekonečně hluboké jámy:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = E \psi, \quad x \in \langle 0, L \rangle \quad (\text{II.37})$$

zatímco v bariérách

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = (E - U) \psi, \quad x \notin \langle 0, L \rangle \quad (\text{II.38})$$

Okrajové podmínky – spojitost $\psi(x)$ a její 1. derivace v bodech $x = 0$ a $x = L$.

Uvažme případ $E < U$, tj. částice je vázána v jámě. Řešení rovnice (II.37) má tvar (II.33), rovnice (II.38) má řešení

$$\begin{aligned} \psi(x) &= C e^{\alpha x} \text{ pro } x < 0, \quad \psi(x) = D e^{-\alpha x} \text{ pro } x > L, \\ \alpha &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U - E)} \end{aligned} \quad (\text{II.38})$$

Použili jsme přitom podmínku $\lim_{x \rightarrow \pm \infty} \psi(x) = 0$ Koeficienty A, B, C, D určíme z okrajových podmínek.

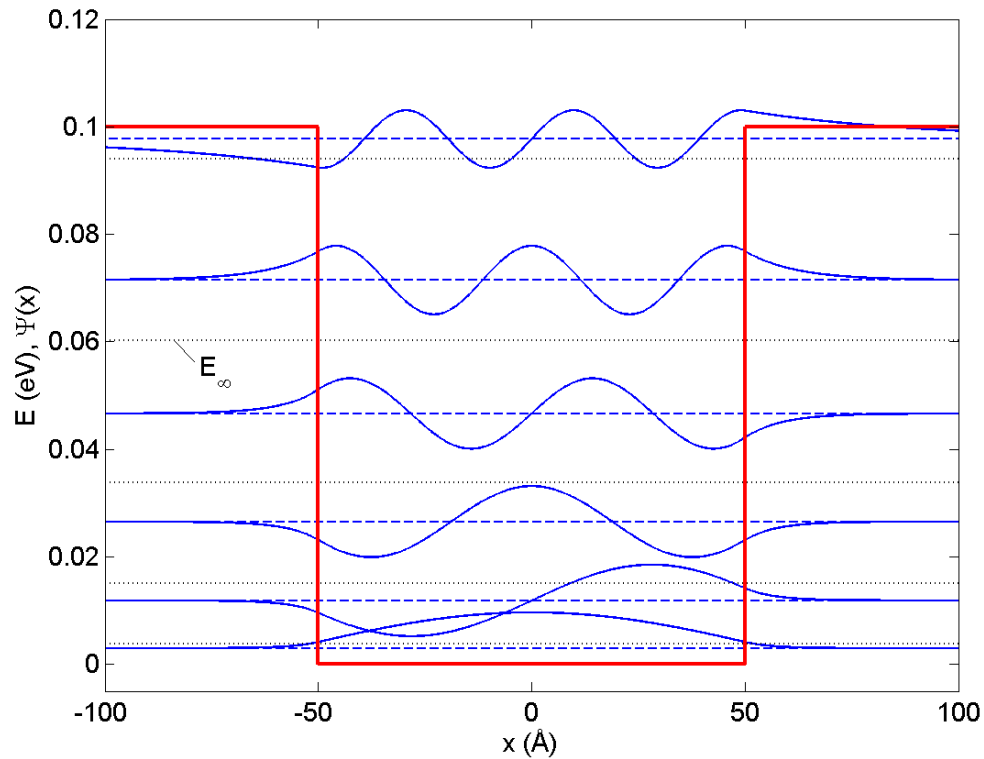
Tyto podmínky lze napsat jako soustavu 4 lineárních homogenních rovnic pro A, B, C, D . Podmínka existence netriviálního řešení této soustavy je, že determinant její matice je nulový:

$$\det = e^{-\alpha L} [k^2 \sin(kL) - 2\alpha k \cos(kL) - \alpha^2 \sin(kL)] = 0 \quad (\text{II.39})$$

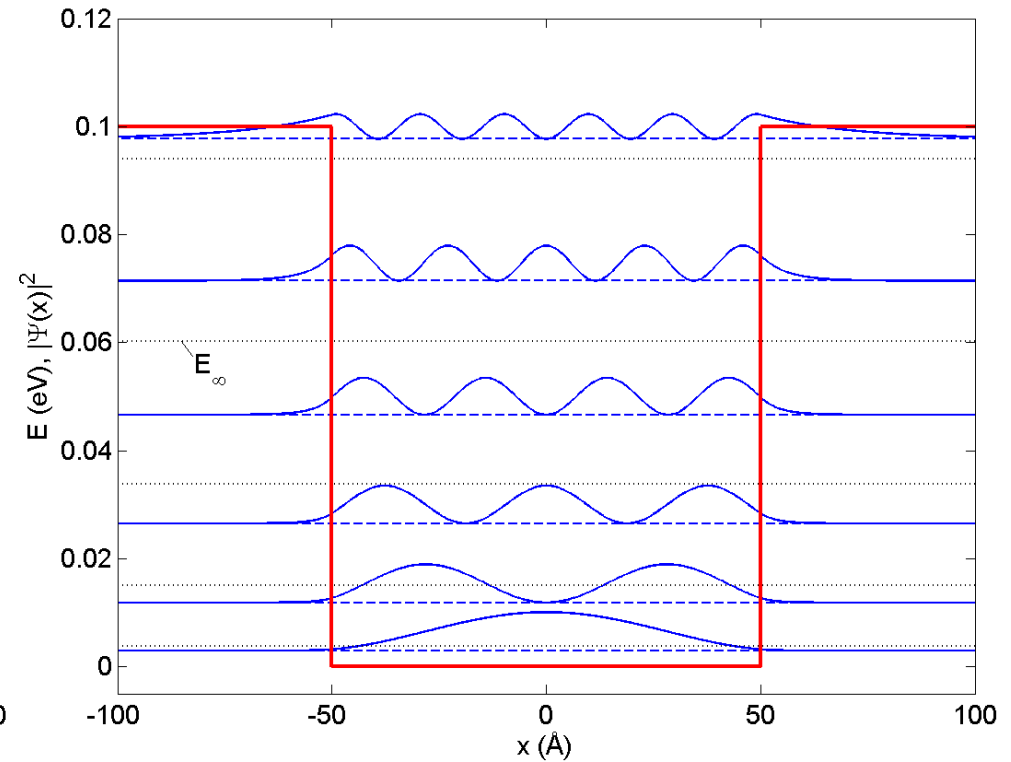
Tento výraz představuje transcendentní rovnici pro E , která má konečně mnoho řešení E_n pro $E < U$:

$$\tan(kL) = \frac{2\alpha k}{k^2 - \alpha^2} \quad (\text{II.40})$$

vlnová funkce



hustota pravděpodobnosti



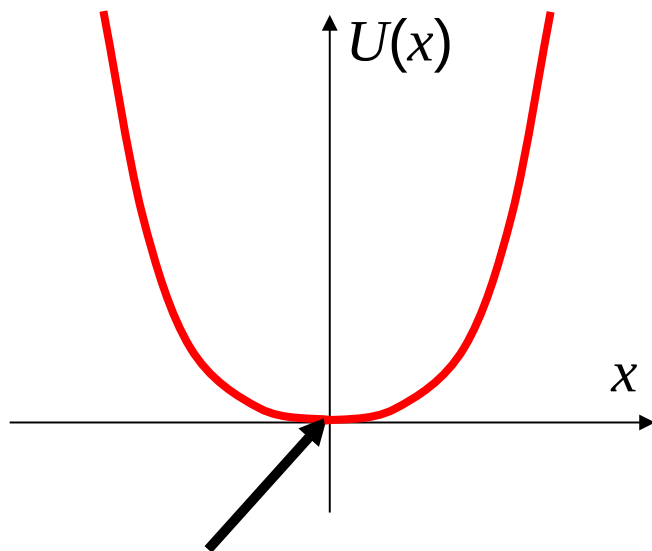
Existuje **nenulová pravděpodobnost nalezení částice v bariéře.**

Částice pronikají do bariéry s efektivní hloubkou vniku:

$$\delta = \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U-E)}} \quad (\text{II.41})$$

Jednorozměrný kvantový harmonický oscilátor

Částice se pohybuje v silovém poli s **parabolickým rozložením potenciální energie**



minimum potenciální energie – stabilní rovnovážná poloha

Potenciální energie
$$U(x) = \frac{1}{2} K x^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (11.42)$$

Klasická fyzika: síla
$$F(x) = -\frac{dU(x)}{dx} = -Kx$$

K je tuhost vazby, ω je vlastní frekvence harmonického oscilátoru.

Schrödingerova rovnice je

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - E \right) \psi(x) \quad (\text{II.43})$$

Tato rovnice má spočetně mnoho řešení

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n! 2^n \sqrt{\pi}}} H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad \xi = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \quad n=0,1,2,\dots \quad (\text{II.44})$$

kde

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}) \quad (\text{II.45})$$

je **Hermiteův polynom** stupně n .

Vlnové funkce (II.44) jsou normovány

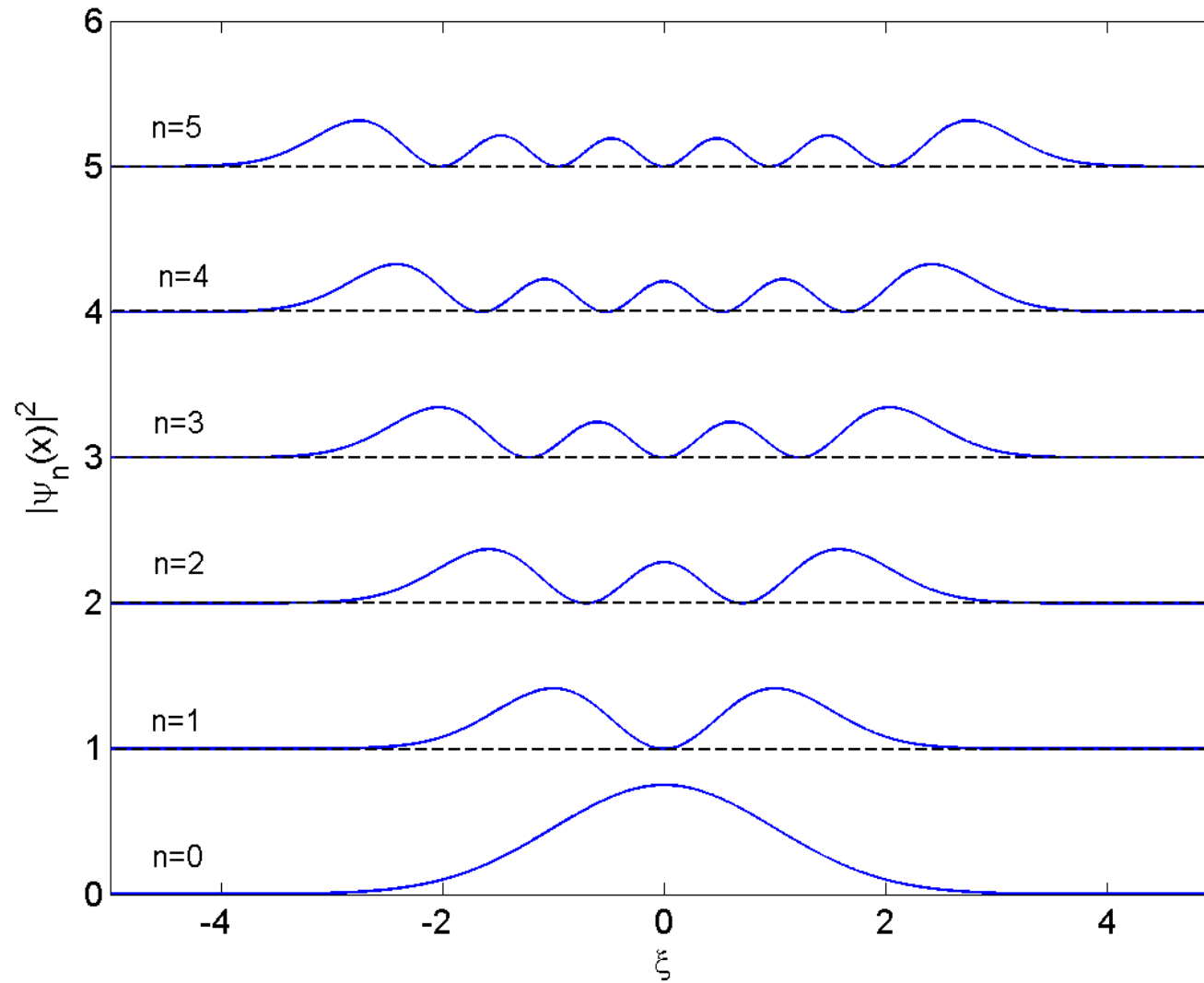
$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \psi_n(\xi) \psi_m(\xi) = \delta_{nm} \quad (\text{II.46})$$

Schrödingerova rovnice (II.43) má netriviální řešení pouze pro diskrétní spektrum energií (**kvantování energie**):

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{II.47})$$

Hustota pravděpodobnosti několika stavů kvantového harmonického oscilátoru

$$P_n(\xi) = |\psi_n(\xi)|^2$$



Základní stav pro $n = 0$:

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega, \quad \psi_0(\xi) = \pi^{-1/4} \exp(-\xi^2/2) \quad (\text{II.48})$$

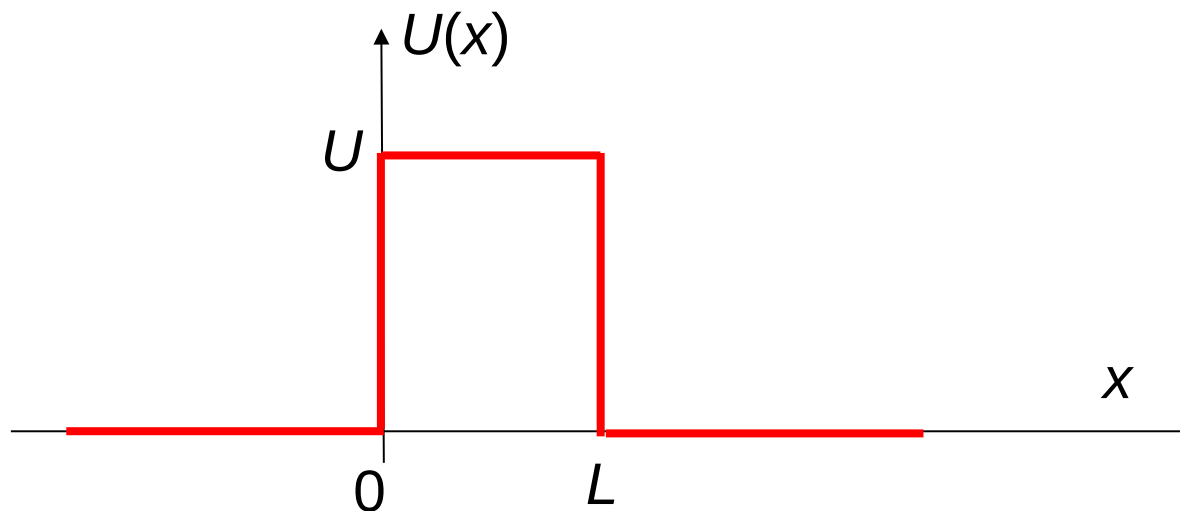
V základním stavu nemůže být $E_0 = 0$, odporovalo by to Heisenbergovu principu neurčitosti.

Srovnání s klasickým oscilátorem:

	klasický:	kvantový:
energie:	spojité spektrum: $E = \frac{1}{2} m \omega^2 A^2$	diskrétní spektrum: $E_n = \hbar \omega (n + \frac{1}{2})$
hustota pravděpodobnosti	$P(x) = \begin{cases} (A^2 - x^2)^{-1/2} / \pi & \text{pro } x < A \\ 0 & \text{pro } x > A \end{cases}$	$P_n(x) = \left \left(n! 2^n \sqrt{\pi} \right)^{-1/2} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) H_n(\xi) \right ^2$
kvantové číslo:	$A \geq 0$, spojité spektrum	$n = 0, 1, 2, \dots$, diskrétní spektrum
základní stav:	$A = 0, E_0 = 0$	$n = 0, E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$

Tok částic potenciálovou bariérou – tunelování

Uvažme částici v silovém poli s profilem potenciální energie



Uvažme nejprve klasickou částici, dopadající na bariéru zleva a mající kinetickou energii $E < U$. Taková částice bariéru nepřekoná a od bariéry se odrazí. Hustota pravděpodobnosti jejího výskytu v bariéře je nulová.

Kvantová částice má nenulovou hustotu pravděpodobnosti výskytu v libovolném bodě x , v němž je $U(x)$ konečné. Její vlnová funkce nalevo od bariéry ($x < 0$)

$$\Psi(x, t) = A e^{-i(\omega t - kx)} + B e^{-i(\omega t + kx)} \quad (\text{II.49})$$

částice se pohybuje zleva doprava
(dopadající částice)

částice se pohybuje zprava doleva
(odražená částice)

Vlnová funkce částice **napravo od bariéry** ($x > L$)

$$\Psi(x, t) = F e^{-i(\omega t - kx)} + G e^{-i(\omega t + kx)} \quad (\text{II.50})$$

Předpoklad: napravo od bariéry nejsou částice, které by se pohybovaly zprava doleva, tj. $G = 0$.

Vlnová funkce částice **uvnitř bariéry** $0 < x < L$ (předpokládáme $E < U$ – viz (II.38))

$$\Psi(x, t) = C e^{-i(\omega t - \alpha x)} + D e^{-i(\omega t + \alpha x)} \quad \alpha = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U - E)} \quad (\text{II.51})$$

Okrajové podmínky – spojitost $\Psi(x, t)$ a její 1. derivace podle x v bodech $x = 0$ a $x = L$.

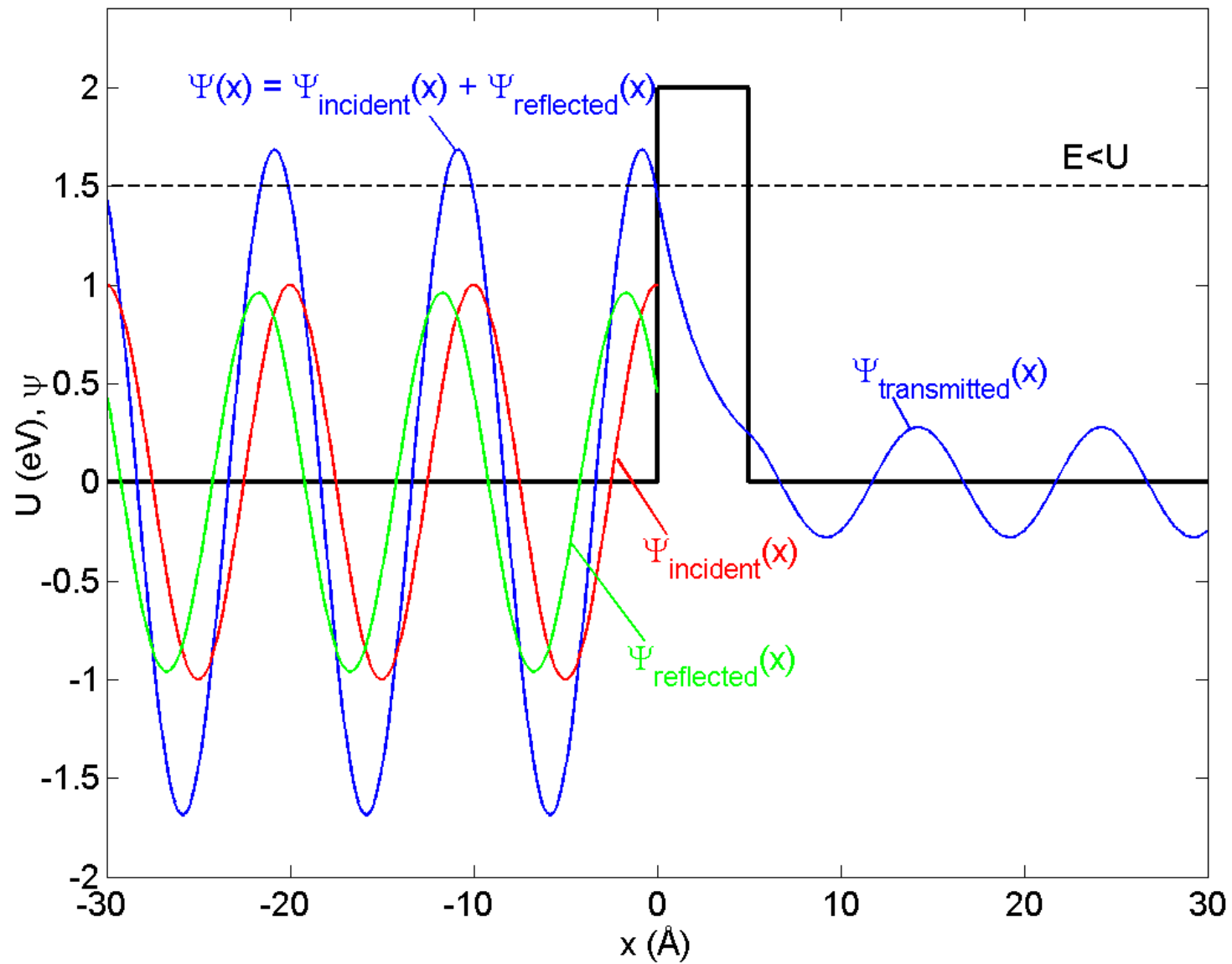
Zavedme **odrazivost** R a **propustnost** T bariéry jako podíly hustot pravděpodobnosti:

$$R = \frac{|\Psi(x, t)|_{\text{reflected}}^2}{|\Psi(x, t)|_{\text{incident}}^2} = \frac{|B|^2}{|A|^2}, \quad T = \frac{|\Psi(x, t)|_{\text{transmitted}}^2}{|\Psi(x, t)|_{\text{incident}}^2} = \frac{|F|^2}{|A|^2} \quad (\text{II.52})$$

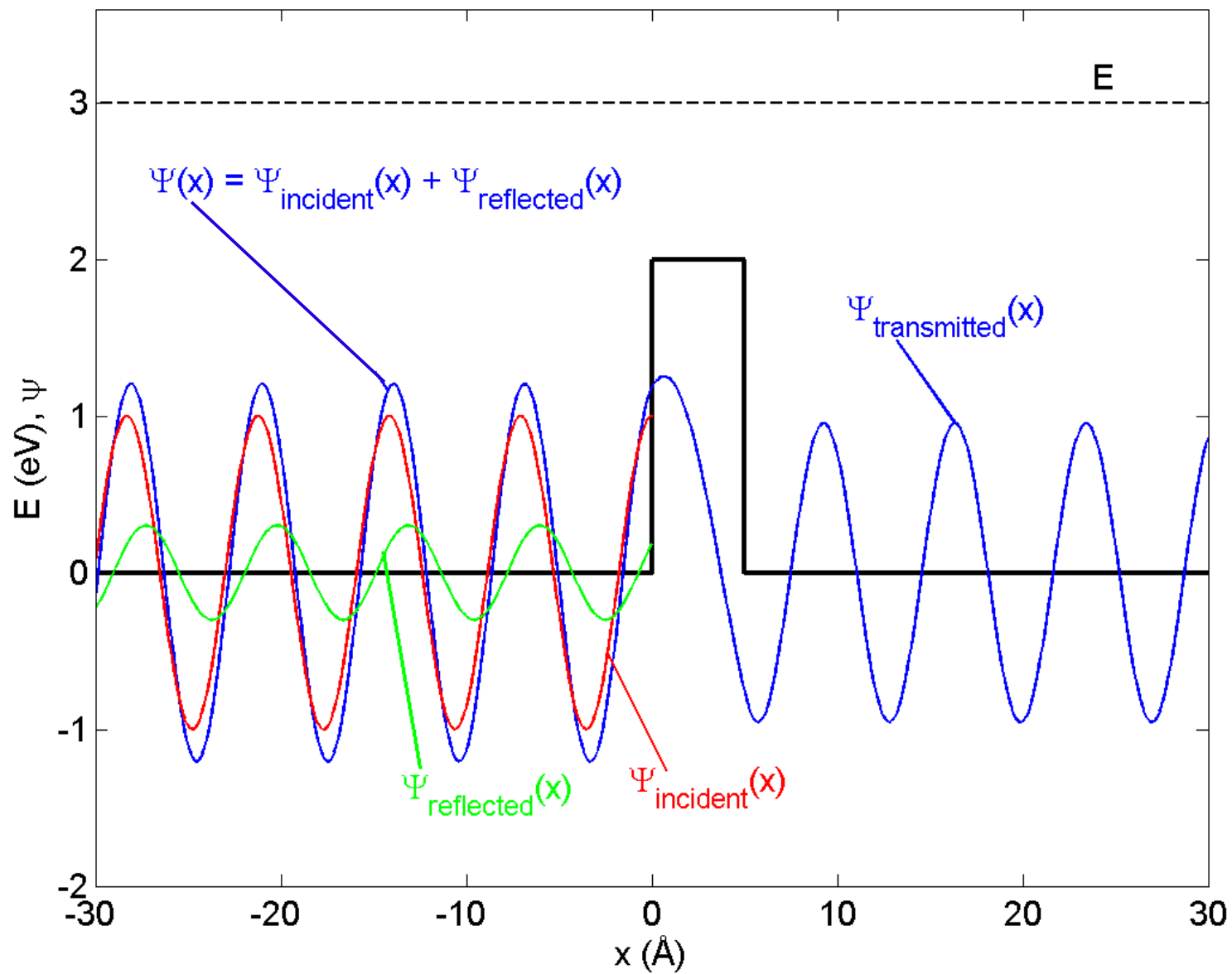
a položíme pro jednoduchost $A = 1$. Z okrajových podmínek dostaneme 4 lineární nehomogenní rovnice pro neznámé B, C, D, F . Tato soustava rovnic má vždy právě jedno řešení pro každou energii E dopadajících částic, tedy i pro $E > U$. Pro propustnost vyjde přibližný vztah (platí pro libovolný tvar bariéry):

$$T \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m} \int_{U(x) > E} dx \sqrt{U(x) - E}\right) \quad (\text{II.53})$$

Příklad výpočtu pro $E < U$:

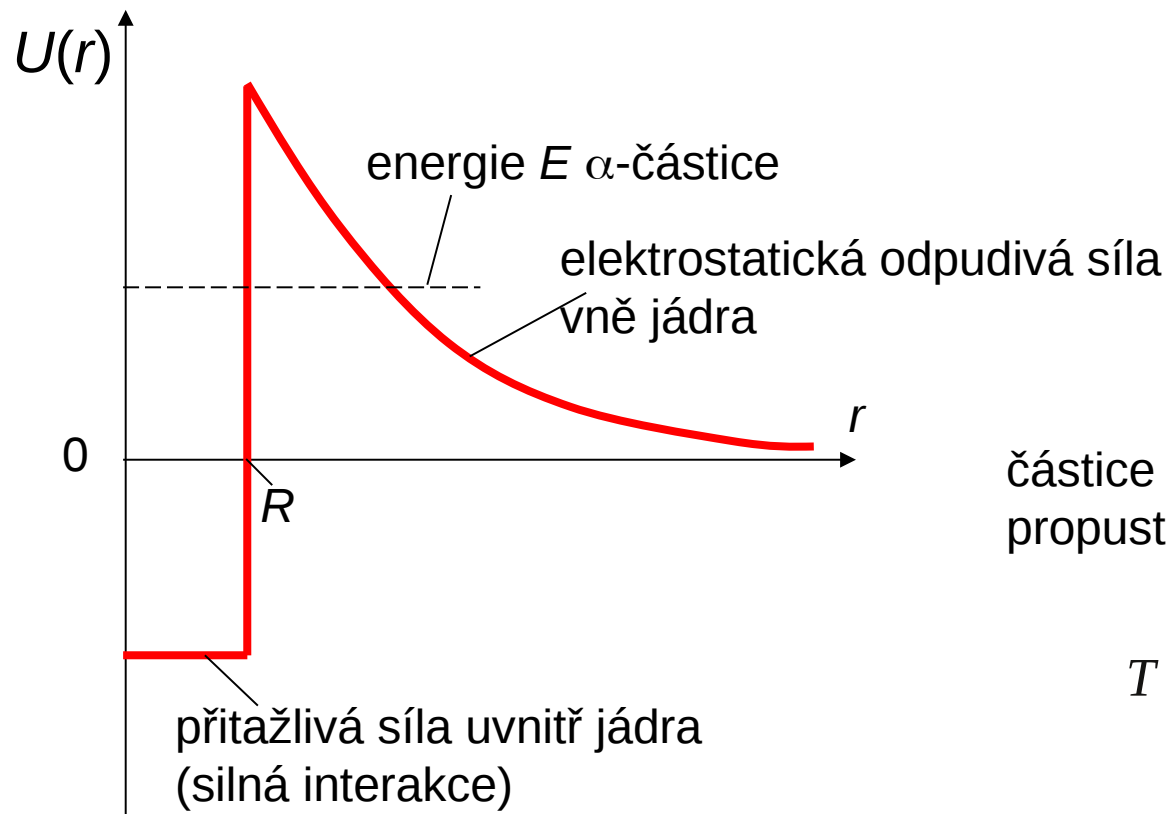


Příklad výpočtu pro $E > U$:



Aplikace: α -rozpad radioaktivních jader

α -částice se nachází v silovém poli s potenciální energií



$$U(r) = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

částice překoná potenciální bariéru tunelováním, propustnost lze získat ze vztahu (II.53)

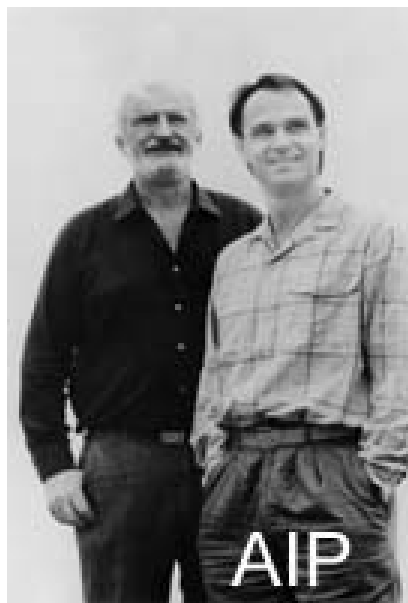
$$T(E) = \exp\left[-4\pi Z\sqrt{\frac{E_0}{E}} + 8\sqrt{\frac{ZR}{r_0}}\right],$$

$$r_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_\alpha e^2} \approx 7.25 \times 10^{-6} \text{ nm},$$

$$E_0 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_0} \approx 0.099 \text{ MeV}$$

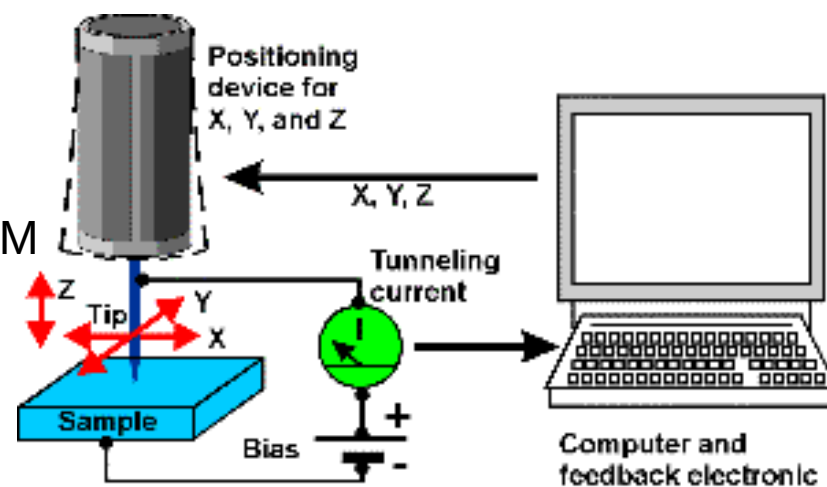
Další aplikace: emise elektronů studenou katodou.

Aplikace: tunelovací mikroskopie (STM)

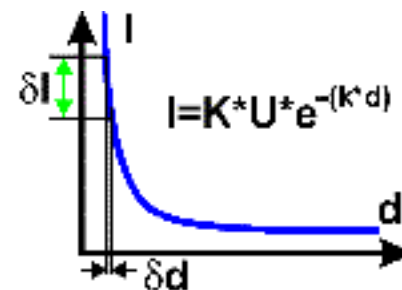
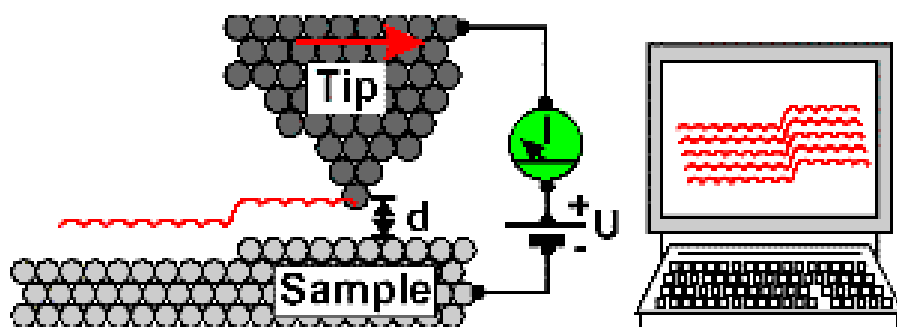


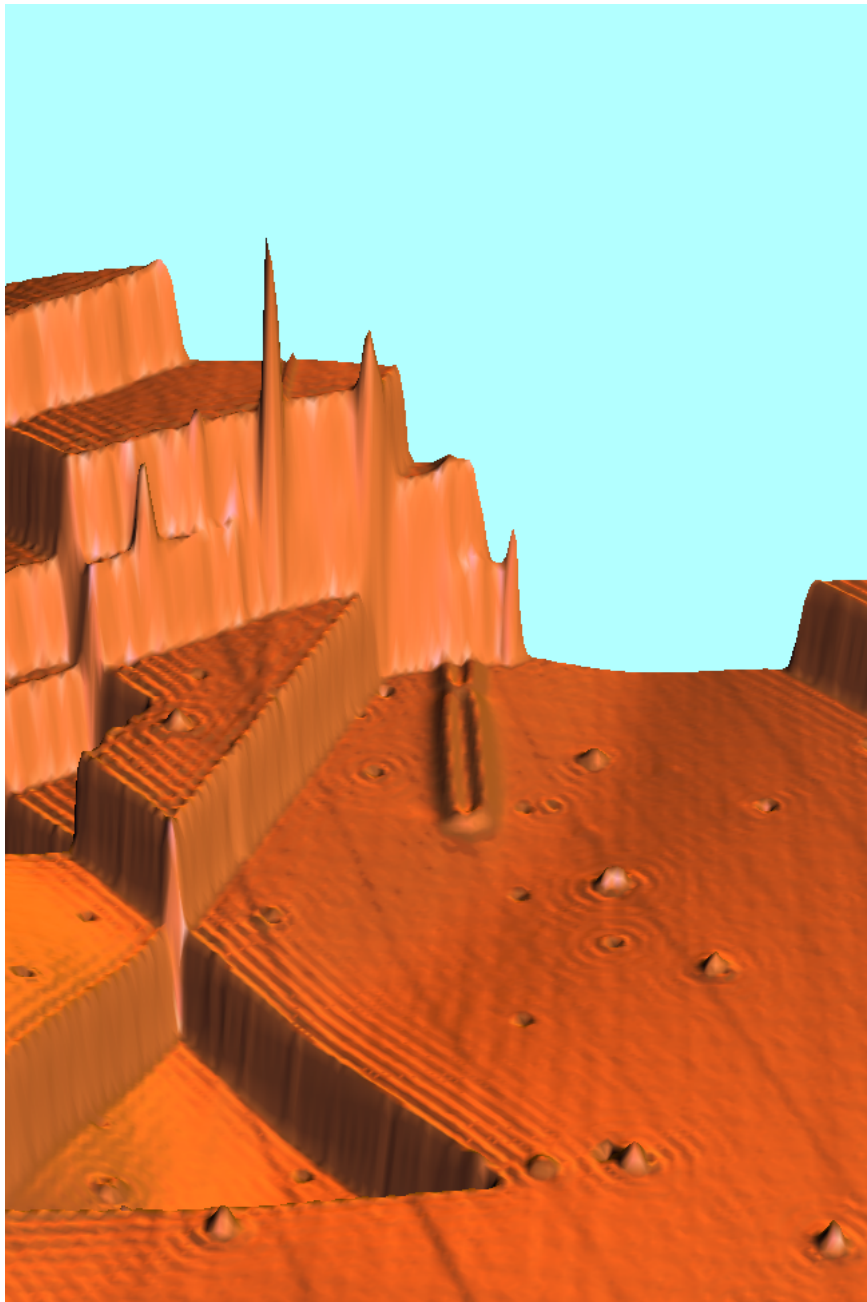
Gerd Binnig (vpravo), Heinrich Rohrer, Nobelova cena 1981

náčrtek principu STM



měření tunelovacího proudu





povrch monokrystalu Ni, jednotlivé atomy jsou rozlišeny

