zapsat

Je důležité udělat přípravu
a pak ten 1 příklad povídaně

1. Částice v jámě (Není nutné stihnout celé. Můžeme pokračovat příště.

Př: Je dána rovnice $1 \cdot y'' + py' + qy = 0$. Nalezněte její řešení

před derivacemi a na pravé straně konstanty/funkce x absolutní člen $= 0$

komentář. Jde o tzv. lineární homogenní d.r. 2. řádu.

Řešení Dá se tvar uhodnout? Hledáme funkci, která, když ji postupně derivujeme, odliší se se sebou samotnou.

$y = e^x$ nevyhovuje, ale $y = e^{sx}$ by vyhovovat mohla

při derivování se dostane před e^{sx} a může zajistit, aby se přičtením derivací funkce navzájem odečetly.

Dosadíme zk. fci do rovnice

$$(e^{sx})'' + p \cdot (e^{sx})' + q \cdot e^{sx} = 0$$

$$s^2 \cdot e^{sx} + p \cdot s \cdot e^{sx} + q \cdot e^{sx} = 0 \qquad \cancel{\text{Sesst.}\ e^{sx}}$$

tzv. Pomocná rovnice $(\underbrace{s^2 + p \cdot s + q}_{0}) \cdot e^{sx} = 0$ kořeny s_1, s_2

1. řešení $y = e^{s_1}$

2. řešení $y = e^{s_2}$

obecné řešení $\boxed{y = c_1 \cdot e^{s_1 x} + c_2 \cdot e^{s_2 x}}$ lineární kombinace 2 řešení

Rovnyslet psát.

Např. pr. $p = 6,\ s = -7$

~~$y = 6$~~

pomocná rovnice (auxiliární) $s^2 + 6s - 7 = 0$

$(s+7)(s-1) = 0$

$s_1 = -7 \quad s_2 = +1$

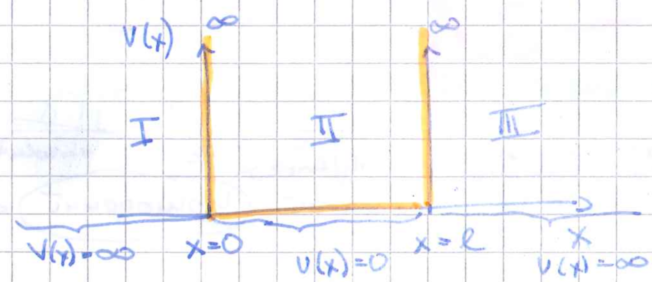
obecné řešení: $y = c_1 \cdot e^{x} + c_2 \cdot e^{-7x}$

2.2. Částice v jednorozměrné jámě

Löwe (angl. uč: „v krabici" particle in a box) one-dimensional

Případ, kdy se časově nezávislá S.R. řeší relativně jednoduše

nekonečně hluboká Potenciálová jáma



Model se jeví jako příliš nerealistický, ale lze s úč. úspěchem použít pro jisté konjugované molekuly (dobrá aproximace) → na koho čili jak

S2

Stacionární Schrödingerova rovnice: $\hat{H}\,\Psi = E\,\Psi$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\Psi = E\Psi, \quad \frac{\hbar^2}{2m}$$

V oblastech I a III, $V(x) = \infty$ Pro konečnou hodnotu

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} = (E - \infty)\Psi$$

Hledáme řešení s konečnou energií, tzn. E vzhl. k ∞ zanedbáme singularita

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \infty\,\Psi \qquad \Psi = \frac{1}{\infty}\frac{d^2\Psi}{dx^2} \qquad \Psi_I = \Psi_{III} = 0$$

funkce musí být všude ∞ x menší než její 2. deriv.

S3

V oblasti II: $$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi_{II} = 0 \qquad (1)$$

přepíšeme do tvaru:

lineární homogenní rovnice 2. řádu

~~pomocná rovnice:~~

zkusíme dosadit e^{sx}

$$\left(e^{sx}\right)'' + \frac{2m}{\hbar^2} E \cdot e^{sx} = 0$$

$$s^2 \cdot e^{sx} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E \cdot \cancel{e^{sx}} = 0$$

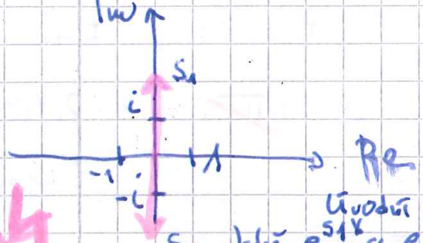
pomocná rovnice $$s^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0$$

$$\cancel{s \cdot \left(s + \frac{2mE}{\hbar^2}\right) = 0}$$

$$s^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$s = \pm\sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}$$

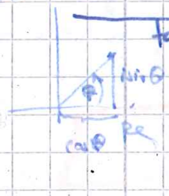
E je nezáporné, neboť $E = V + T$; $V = 0$, T nezáporné



S4

úvodní příklad: když $e^{s_1 x}$ a $e^{s_2 x}$ jsou řešením, tak i jakákoli LC je řešením

$$\boxed{s = \pm\frac{\sqrt{-1}\,\sqrt{2mE}}{\hbar} = \pm i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}} \qquad (2) \text{ nechat na tabuli}$$



$$\psi_{II} = c_1 \cdot e^{i\underbrace{(2mE)^{1/2}x/\hbar}_{\theta}} + c_2\, e^{-i\underbrace{(2mE)^{1/2}x/\hbar}_{\theta}}$$

$$\psi_{II} = c_1 \cdot e^{i\theta} + c_2 \cdot e^{-i\theta} \qquad (3)$$

exponenc. fce imaginárního argumentu; tzv. Eulerův vzorec

? Co je $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$ — komplex. č. v goniom. tvaru; odvozuje se pomocí Tayl. věty

kompl. č. v exp. tvaru

$$e^{-i\theta} = \cos(-\theta) + i\sin(-\theta) = \cos\theta - i\sin\theta$$

$$e^x = 1 + \frac{1}{1!}\cdot x^1 + \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 + \dots$$

Proto: $$\psi_{II} = c_1\cos\theta + i c_1 \sin\theta + c_2\cos\theta - i c_2 \sin\theta =$$

$$= \underbrace{(c_1 + c_2)}_{A}\cos\theta + \underbrace{(ic_1 - ic_2)}_{B}\sin\theta =$$

$$= \underbrace{A\cos\theta + B\sin\theta}$$

nové kompl. konstanty

S5 4/10 ① Tedy zopak. $\left[\Psi_{II} = A\cos\left[\hbar^{-1}(2mE)^{1/2}x\right] + B\sin\left[\hbar^{-1}(2mE)^{1/2}x\right]\right]$

④ Pak by došlo okrajové podmínky tak vhodně použít.
volba soustavy souřadnic je na mém rozhodnutí
při u. od $-\ell$ do 0 by se vytvářela podm. ℓ
Důležité je posunutí ℓ
ve posunutí na osu x.

Vlnová funkce musí být spojitá (P1)

②
$$\Rightarrow \lim_{x\to 0} \Psi_I = \lim_{x\to 0} \Psi_{II}$$

③ Co kdybychom použili? $\lim_{x\to \ell} \Psi_{II} = \lim_{x\to \ell} \Psi_{III}$

konec 18/9/2014

$$0 = \lim_{x\to 0} \left\{A\cdot\cos\left[\hbar^{-1}(2mE)^{1/2}x\right] + B\sin\left[\hbar^{-1}(2mE)^{1/2}x\right]\right\}$$

tzv. vazebná koncová podmínka

$$0 = A \quad (\text{protože } \sin 0 = 0 \text{ a } \cos 0 = 1)$$

KONEC 20/10 2012

S6 Proto $\Psi_{II} = B\cdot\sin\left[\hbar^{-1}(2mE)^{1/2}x\right]$ ✓ (4)

B? E? ✓ ✓
2. vazebná podmínka?

$$\lim_{x\to \ell} \Psi_{II} = 0 \checkmark$$

$$\lim_{x\to \ell} B\sin\left[\hbar^{-1}(2mE)^{1/2}\cancel{x}\right] = 0 \checkmark$$

$B \neq 0$ (jinak $\Psi = 0$ všude… prázdná jáma ~~nebyla by ...~~)

(spojitá funkce) tedy $\sin\left[\hbar^{-1}(2mE)^{1/2}\ell\right] = 0$

$$\hbar^{-1}(2mE)^{1/2}\ell = 0, \pm\pi, \pm 2\pi, \dots \pm n\pi$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$\frac{2\pi}{h}(2mE)^{1/2}\ell = \pm n\pi \quad (5)$$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

konec 17/9/2013

(1) hodnota $n=0$: zvláštní případ. Dostáváme $E=0$.

Pro $E=0$, kořeny rovnice (2) jsou stejné a (3)
není úplným řešením S.R. Pro úplné řešení se musíme
vrátit k (1):
$$\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} + 0 = 0$$

D: co to znamená? u H

1. Integrace
$$\frac{d\Psi_{II}}{dx} = c$$

2. Integrace
$$\Psi_{II} = cx + d \quad \text{konstanty}$$

Protože: $\Psi_{II} = 0$ pro $x = 0 \Rightarrow d = 0$

$\Psi_{II} = 0$ pro $x = \ell \Rightarrow c = 0$

Proto: $\Psi_{II} = 0$ pro všechna x při $E = 0$

prázdná jáma — zakázaná hodnota

? souvisí s relacemi neurčitosti

(Je-li částice omezena v jámě, musí mít nenulovou energii)