

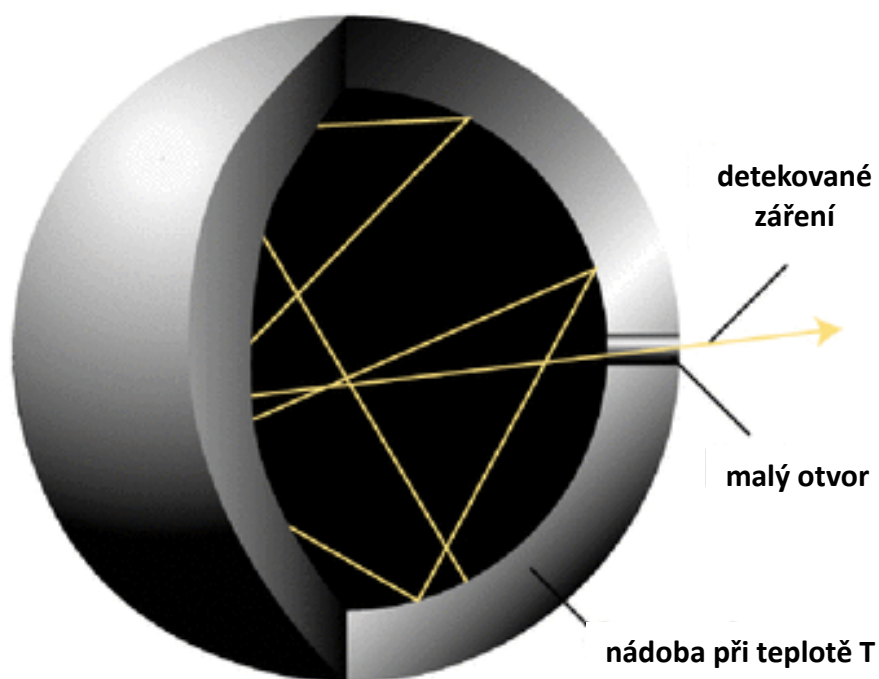
3. Úvod do kvantové mechaniky, atomové orbitaly

Ohromné úspěchy, kterých dosáhla klasická fyzika, vedly na konci 19. století k přesvědčení, že fyzikální obraz světa je téměř dokončen. Existovaly však i jevy, které se pomocí klasické fyziky stále nepodařilo objasnit. K těmto neobjasněným jevům patřily zejména záření absolutně černého tělesa, fotoelektrický jev a optická čárová spektra vodíku.

Záření absolutně černého tělesa

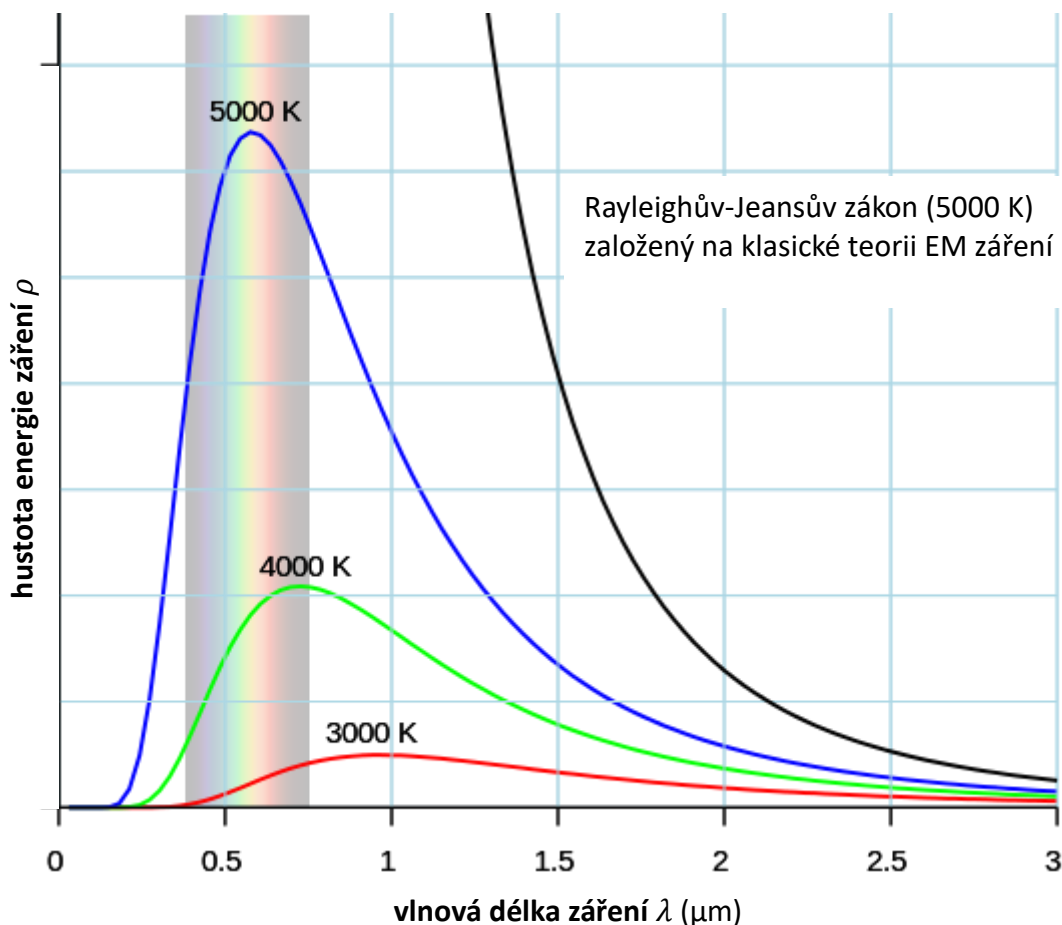
V roce 1860 německý fyzik Gustav Robert Kirchhoff definoval tzv. **absolutně černé těleso** jako hypotetické těleso, které by bylo schopno absorbovat veškeré elektromagnetické vlnění dopadající na jeho povrch. Absolutně černé těleso je současně ideální zářič emitující elektromagnetické záření všech vlnových délek, jehož vyzařovací charakteristika, tj. závislost intenzity emitovaného záření na vlnové délce, je určována pouze jeho teplotou. Záření absolutně černého tělesa úzce souvisí s elektromagnetickým zářením emitovaným tělesy zahřátými nad 700 °. To byl také důvod, proč bylo záření absolutně černého tělesa koncem 19. století intenzivně studováno, jak experimentálně, tak i teoreticky.

Pro experimentální studie se absolutně černé těleso realizuje tělesem udržovaným na konstantní teplotě s velkou dutinou a malým otvorem:



Záření vstupující z vnějšku otvorem do dutiny se po mnoha odrazech uvnitř prakticky zcela pohltí, i když stěny dutiny nevykazují stoprocentní absorpci. Vnějšímu pozorovateli se pak ploška otvoru bude jevit jako černé těleso a aproximace bude tím lepší, čím menší bude otvor vzhledem k rozměrům dutiny. Záření, které z dutiny taktového tělesa otvorem vystupuje, je ekvivalentní záření absolutně černého tělesa.

Pro závislost hustoty energie záření ρ (J m^{-3}) absolutně černého tělesa na vlnové délce λ je typický prudký spád k nule v oblasti krátkých vlnových délek a posun polohy maxima s rostoucí teplotou T ke kratším vlnovým délkám, což je ukázáno na následujícím obrázku:



Při snaze vysvětlit tuto závislost angličtí fyzikové John William Strutt, 3. baron Rayleigh a sir James Hopwood Jeans odvodili vztah vycházející z tehdejší klasické fyziky, kde je energie vlny emitovaného elektromagnetického záření určována její amplitudou naprosto nezávislou na vlnové délce nebo frekvenci a může nabývat všech možných hodnot. Tento vztah je známý jako **Rayleighův-Jeansův zákon**:

$$\rho = \frac{8\pi kT}{\lambda^4}$$

kde $k = 1,3806504 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ je Boltzmannova konstanta. Podle tohoto vztah však hodnota ρ směrem ke kratším vlnovým délkám bez omezení roste. Tomuto nesouladu klasické teorie s experimentem se pak podle oblasti vlnových délek, ve které k němu dochází, začalo říkat **ultrafialová katastrofa**.

Všechny pokusy o pochopení tohoto výsledku selhaly, dokud německý fyzik Max Karl Ernst Ludwig Planck v roce 1900 nepřišel s hypotézou, že energie emitované elektromagnetické vlny s frekvencí ν a vlnovou délkou λ může nabývat pouze celočíselných násobků $h\nu$:

$$E = nh\nu = n \frac{hc}{\lambda}$$

kde n je celé nezáporné číslo, $c = 299792458 \text{ m s}^{-1}$ je rychlost světla ve vakuu a $h = 6,62606896 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ je nová fundamentální přírodní konstanta nyní známá jako **Planckova konstanta**. Na základě tohoto předpokladu pak odvodil vztah známý jako **Planckův vyzařovací zákon**:

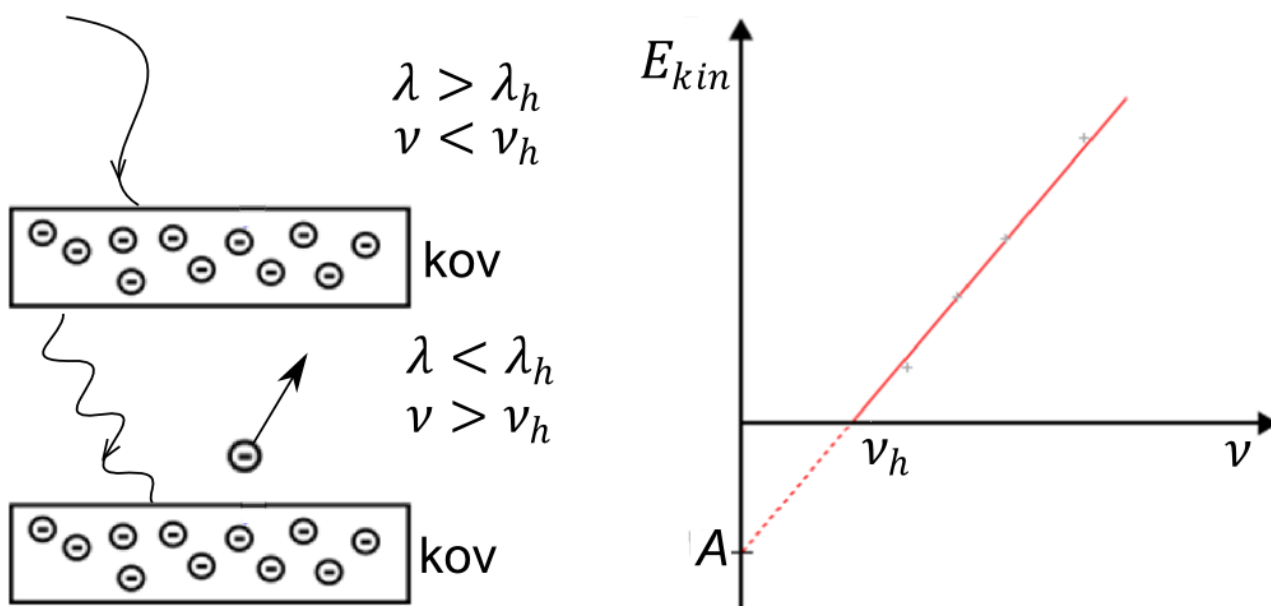
$$u(\lambda) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}$$

Vyjádříme-li Planckovu rovnici pomocí frekvencí ν , dostaneme

$$u(\nu) = \frac{8\pi \nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

Fotoelektrický jev

Planckův vztah zůstal nepovšimnutý, dokud v roce 1905 německý fyzik Albert Einstein neobjasnil **fotoelektrický jev** – emisi elektronů z kovů při dopadu viditelného nebo ultrafialového záření. Fotoelektrický jev byl pozorován již v devatenáctém století. Sám jev nebyl záhadný; že jsou v kovu volně pohyblivé elektrony, se předpokládalo (například při výkladu elektrické vodivosti) a energii potřebnou k překonání vazby, která je držela v objemu kovu, mohla dodat elektromagnetická vlna (elektrické pole světelné vlny působí na elektron silou úměrnou intenzitě pole E , intenzita světla $I \sim E^2$). Překvapující a pro tehdejší klasickou fyziku nevysvětlitelné však bylo, že k emisi docházelo jen pro světlo s frekvencí $\nu > \nu_h$, přičemž hraniční frekvence ν_h byla pro různé kovy různá, a že kinetická energie vyletujících elektronů závisela jen na frekvenci světla, a to lineárně. Růst intenzity světla dané frekvence zvětšoval pouze počet emitovaných elektronů, nikoliv jejich energii. Z hlediska klasické fyziky mělo zvětšení intenzity světla vést ke zvětšení intenzity elektrického pole vlny a to mělo urychlit elektron na větší rychlost při výstupu z kovu; to však nikdy pozorováno nebylo.



Uvedené zákonitosti Einstein jednoduše objasnil, když předpokládal, že energie monochromatické stojaté vlny s frekvencí ν se může elektronům v kovu předávat jen po kvantech $h\nu$. Jestliže k vytržení elektronu z kovu je nutná energie A , bude kinetická energie E_{kin} vyletujícího elektronu

$$E_{kin} = h\nu - A$$

kde A je tzv. **výstupní práce** dané látky; je to materiálová konstanta nezávislá na ν . Zvětšení (zmenšení) intenzity monochromatické vlny s frekvencí ν znamená zvětšení (zmenšení) počtu dopadajících částic – **fotonů** – s energií $h\nu$ a tím i zvětšení (zmenšení) počtu emitovaných elektronů.

Objasnění mechanismu fotoefektu bylo dílčím výsledkem práce, v níž Einstein ukázal, že Planckovu rovnici lze získat, předpokládáme-li, že elektromagnetické vlnění v dutině černého tělesa má korpuskulární charakter. Po úspěšném rozvoji optiky v 19. století završeném Maxwellovou teorií se zdálo, že vlnová povaha světla je nepochybná. Einsteinova práce však ukazovala, že k objasnění některých jevů bude nutné přijmout částicovou (korpuskulární) představu, i když k výkladu jiných (interference, difrakce, ohyb) bude zase potřeba zůstat u představy vlnové. Budoucnost ukázala, že tato dvojakost projevů světla, tzv. **korpuskulárně-vlnový dualismus**, patří spolu s nespojitou změnou (kvantováním) některých fyzikálních veličin k základním charakteristikám mikrosvěta.

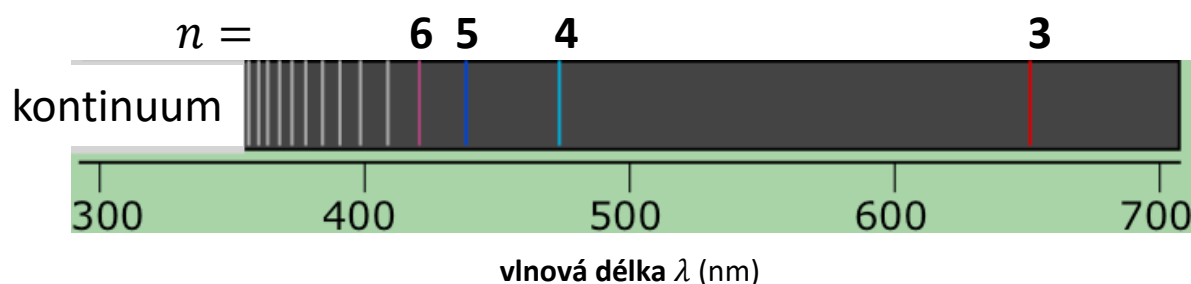
Optická čárová spektra vodíku

Na konci 19. století již bylo známo, že každý prvek má své neměnné a dokonale reprodukovatelné čárové spektrum, podle kterého může být jednoznačně identifikován. Mechanismus vzniku čárových spekter však byl hádankou, jejíž řešení zřejmě souviselo s problémem stavby atomů.

V roce 1885 švýcarský matematik a fyzik Johann Jakob Balmer empiricky odvodil rovnici pro vlnové délky odpovídající tehdy známým čarám vodíkového spektra

$$\lambda_n = b \frac{n^2}{n^2 - 4}$$

kde $b = 3645,6 \cdot 10^{-10}$ m a $n \in \{3, 4, \dots, 11\}$.



Tato rovnice byla první kvantitativní závislostí v teorii spekter.

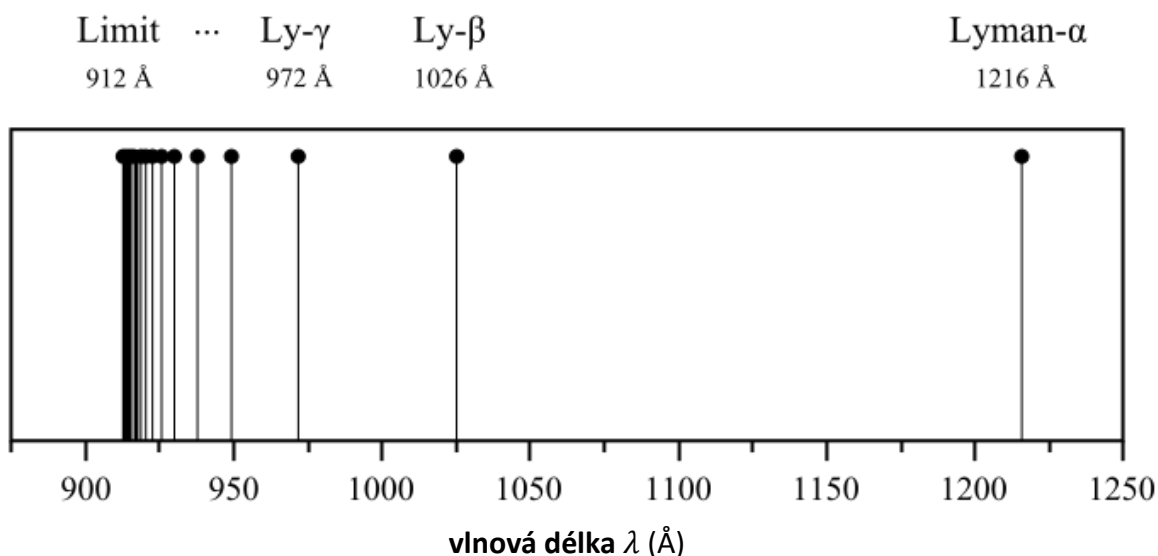
Přejdeme-li v Balmerově vztahu k vlnočtům $\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda}$, bude

$$\tilde{\nu} = R_{\infty} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

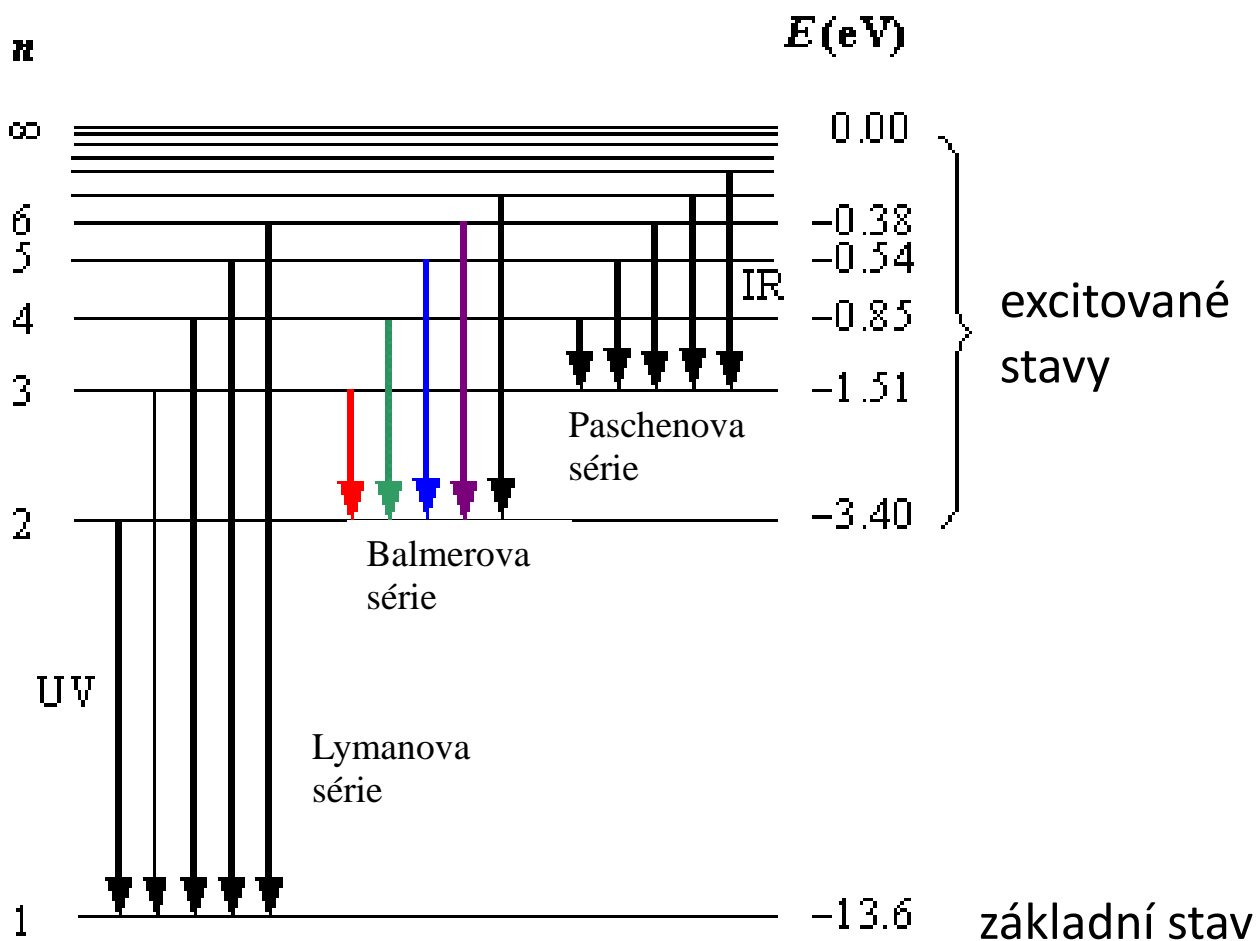
kde $n \in \{3, 4, \dots, 11\}$ a $R_{\infty} = 10973731,568527$ m⁻¹ je Rydbergova konstanta. Tento tvar rovnice navozuje myšlenku existence i jiných sérií čar, pro něž by platilo

$$\tilde{\nu} = R_{\infty} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

kde m a n jsou celá čísla. V roce 1906 pak skutečně americký fyzik Theodore Lyman v ultrafialové oblasti objevil sérii odpovídající $m = 1$ a $n \in \{2,3,4, \dots, \infty\}$:



Ve stejném roce pak německý fyzik Louis Carl Heinrich Friedrich Paschen našel v infračervené oblasti sérii s $m = 3$ a $n \in \{4,5,6, \dots, \infty\}$. V roce 1922 americký fyzik Frederick Sumner Brackett v infračervené oblasti objevil sérii odpovídající $m = 4$ a $n \in \{5,6,7, \dots, \infty\}$ a v roce 1924 další americký fyzik August Herman Pfund v infračervené oblasti našel sérii odpovídající $m = 5$ a $n \in \{6,7, \dots, \infty\}$.



Bohrův model atomu

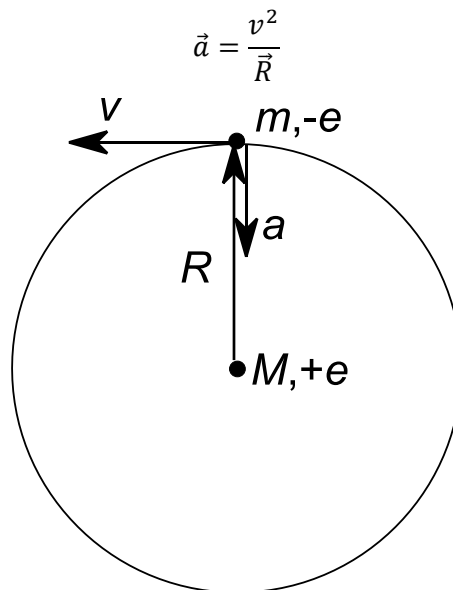
V roce 1913 se dánský fyzik Niels Henrik David Bohr se pokusil o spojení Planckovy a Einsteinovy kvantové hypotézy s Rutherfordovým modelem atomu. Jeho cílem bylo především objasnit stavbu atomu a vznik čárových spekter. Bohr předpokládal, že elektron v atomu se může nacházet jen na kruhových orbitách, jejichž poloměr \vec{R} vyhovuje podmínce

$$m\vec{v}\vec{R} = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar$$

kde m je hmotnost elektronu, \vec{v} je jeho rychlost a $n \in \{1,2,3,\dots\}$, a na těchto stacionárních drahách elektron nevyzařuje elektromagnetické vlnění. Dále Bohr předpokládal, že atom emituje nebo absorbuje elektromagnetické záření pouze při přechodu elektronu z jednoho stacionárního stavu do druhého. Při přechodu ze stavu s energií E_i do stavu s energií E_f se emituje (je-li $E_i > E_f$) nebo absorbuje ($E_f > E_i$) foton s energií $h\nu$ (monochromatické vlnění s frekvencí ν), ve shodě s Planckovou hypotézou, takže

$$h\nu = E_i - E_f$$

Atom vodíku je podle Rutherforda a Bohra tvořen jádrem s hmotností M a nábojem $+e$, kolem něhož obíhá elektron s hmotností m a nábojem $-e$. Protože $M \cong 2000m$, můžeme s dobrou aproximací považovat jádro za nehybné. Velikost dostředivého zrychlení elektronu, který se pohybuje rovnoměrně rychlostí \vec{v} po kruhové orbitě s poloměrem \vec{R} , je



Mezi jádrem a elektronem působí podle Coulombova zákona přitažlivá síla velikosti

$$\vec{F} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{R^2}$$

kde $\epsilon_0 = 8,854187817 \cdot 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$ je permitivita vakua a $e = 1,602176487 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ je elementární náboj. Podle druhého Newtonova zákona $\vec{F} = m\vec{a}$, takže dvojnásobek kinetické energie $2T$ je

$$mv^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$$

Protože potenciální energie elektronu na orbitě je

$$V = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\vec{R}}$$

je celková energie $E = T + V$ rovna

$$E = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \vec{R}}$$

Ze vztahu pro $2T$ a kvantové podmínky dostaneme vztah pro poloměry stacionárních orbit:

$$\vec{R}_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} n^2$$

kde $n \in \{1, 2, \dots\}$. Dosazením do vztahu pro celkovou energii získáme vztah pro celkovou energii v n -tém stacionárním stavu

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R_n} = -\frac{1}{2} \frac{me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

kde $n \in \{1, 2, \dots\}$. Základní stav (s nejnižší energií) atomu vodíku odpovídá kvantovému číslu $n = 1$, poloměr příslušné orbity R_1 je tzv. Bohrov poloměr

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

a energie elektronu na této orbitě je

$$E_1 = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} = -13,606 \text{ eV}$$

Hodnota $I_1 = -E_1 = 13,606 \text{ eV}$ je ionizační energie (ionizační potenciál) pro vodíkový atom, tj. energie potřebná k odtržení elektronu od jádra (převedení ze stavu $s = 1$ do stavu $s \rightarrow \infty$).

De Broglieho hypotéza

Roku 1924 dospěl francouzský fyzik Louis Victor Pierre Raymond de Broglie ve své disertační práci k přesvědčení, že korpuskulárně-vlnový dualismus by se neměl týkat jen světla, ale všech mikročástic (tehdy jmenovitě elektronů). De Broglie dospěl k závěru, že každá částice s hybností \vec{p} , hmotností m , a rychlostí \vec{v} se současně chová jako vlna, jejíž vlnovou délku λ , tzv. **de Broglieho vlnovou délku** dostaneme ze vztahu

$$\lambda = \frac{h}{\vec{p}} = \frac{h}{m\vec{v}}$$

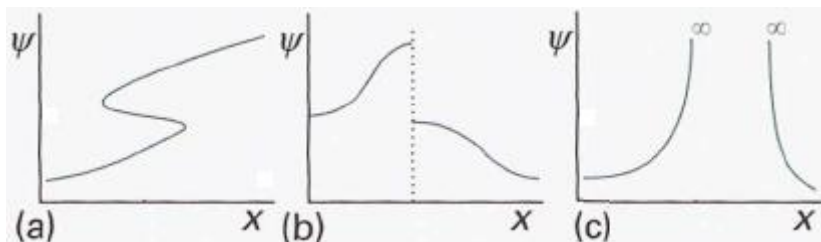
Pro elektrony s kinetickou energií T v eV je možné tento vztah upravit na praktický tvar

$$\lambda[\text{nm}] = \sqrt{\frac{1,504}{T[\text{eV}]}}$$

Vlnová funkce, operátor, vlastní funkce a hodnoty operátoru, Schrödingerova rovnice

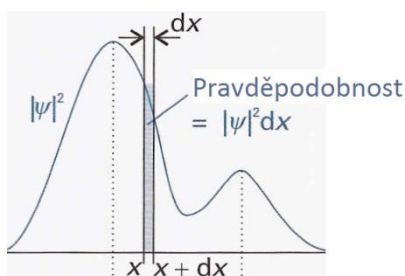
De Broglieho práce si všiml rakouský fyzik Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger, který v té době působil v Zürichu. Schrödinger vyšel z předpokladu, že chovají-li se všechny částice jako vlny, lze celý systém popsat tzv. **vlnovou funkcí** Ψ souřadnic všech částic a času, která obsahuje všechny dostupné informace o systému, který popisuje.

Aby vlnová funkce byla fyzikálně přijatelná, musí mít určité vlastnosti: Vlnová funkce musí být jednoznačná (každé sadě souřadnic a času odpovídá pouze jedna hodnota vlnové funkce), spojitá a kvadraticky integrovatelná, tj. existuje konečná hodnota výrazu $\iiint_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz$. Fyzikálně nepřijatelné jsou například funkce na následujících obrázcích:

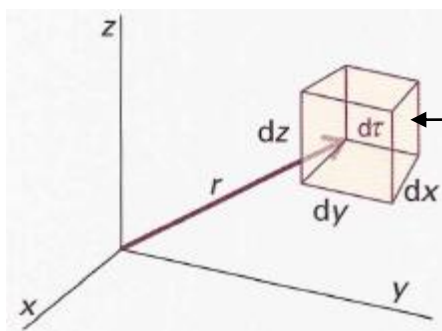


- a) Chybí jednoznačnost.
- b) Chybí spojitost.
- c) Roste do ∞ , tj. není kvadraticky integrovatelná.

Vlnová funkce jako taková nemá fyzikální význam. Fyzikální význam má až druhá mocnina absolutní hodnoty vlnové funkce v daném bodě a čase $|\Psi|^2 = \Psi^* \cdot \Psi$ (Ψ^* je funkce komplexně sdružená k funkci Ψ). Podle tzv. **Bornovy pravděpodobnostní interpretace** je to obecně hustota pravděpodobnosti výskytu částice ve velmi malé části prostoru obklopující daný bod a v daném čase. Pro 1 částici a 1 rozměr $|\Psi(x', t)|^2 dx$ udává hustotu pravděpodobnosti nalezení částice v čase t ve velmi malé oblasti na ose x mezi x' a $x' + dx$:



Pro 1 částici a 3 rozměry $|\Psi(x', y', z', t)|^2 dx dy dz$ udává pravděpodobnost nalezení částice v čase t ve velmi malé části prostoru s x současně mezi x' a $x' + dx$, s y současně mezi y' a $y' + dy$ a s z současně mezi z' a $z' + dz$.



← pravděpodobnost nalezení částice současně mezi x' a $x' + dx$, y' a $y' + dy$ a z' a $z' + dz$

S jistotou víme, že částice se někde v prostoru určitě vyskytuje, proto hustota pravděpodobnosti jejího výskytu v malé části prostoru, tj. druhá mocnina absolutní hodnoty vlnové funkce integrovaná přes celý prostor se musí rovnat jedné:

$$\int \Psi^* \cdot \Psi d\tau = \int |\Psi|^2 d\tau = 1$$

O vlnové funkci splňující tuto podmínku říkáme, že je normovaná.

Jak bylo řečeno, vlnová funkce obsahuje všechny dostupné informace o systému, který popisuje. Tyto informace se z vlnové funkce získávají pomocí **operátorů**. Operátor je matematický předpis, který jedné funkci přiřadí jinou funkci. V kvantové mechanice má svůj operátor každá měřitelná fyzikální veličina.

Pokud působením operátoru \hat{O} na funkci f získáme stejnou funkci vynásobenou pouze konstantou c , tj. platí li rovnice

$$\hat{O}f = cf$$

nazýváme funkci f **vlastní funkcí** operátoru \hat{O} a hodnotu c jeho **vlastní hodnotou**. Vlastními hodnotami operátorů fyzikálních veličin působících na vlnovou funkci popisující systém jsou jejich měřitelné hodnoty.

Dosadíme-li do rovnice $\hat{O}f = cf$ místo operátoru \hat{O} operátor celkové energie, neboli **hamiltonián** \hat{H} a místo funkce f vlnovou funkci Ψ , dostaneme tzv. **časově nezávislou Schrödingerovu rovnici**

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

kde E je energie příslušející dané vlnové funkci. Z klasické mechaniky víme, že celková energie se skládá z energie kinetické a potenciální. Proto i hamiltonián je součtem operátoru kinetické energie \hat{T} a operátoru potenciální energie \hat{V}

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

Výraz pro operátor kinetické energie \hat{T} má v souřadnicové reprezentaci tvar

$$\hat{T} = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2$$

kde $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05457163 \cdot 10^{-34}$ Js je redukovaná Planckova konstanta, m je hmotnost částice a ∇^2 je tzv. laplacián, pro který platí

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Operátor potenciální energie \hat{V} zahrnuje vzájemné působení mezi jádry (repulze jader), vzájemné působení mezi elektrony, (repulze elektronů) a vzájemné působení mezi jádry a elektrony (atrakce jader a elektronů). Toto vzájemné působení má původ v coulombovských interakcích. Proto má výraz pro operátor potenciální energie v souřadnicové reprezentaci tvar

$$\hat{V} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j;i \neq j} \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$

kde $\epsilon_0 = 8,854147817 \cdot 10^{-12}$ F m⁻¹ je permitivita vakua, q je náboj částice a r je vzdálenost mezi částicemi.

Dosadíme-li do výrazu pro hamiltonián \hat{H} výrazy pro operátory kinetické a potenciální energie, dostaneme Schrödingerovu rovnici ve tvaru

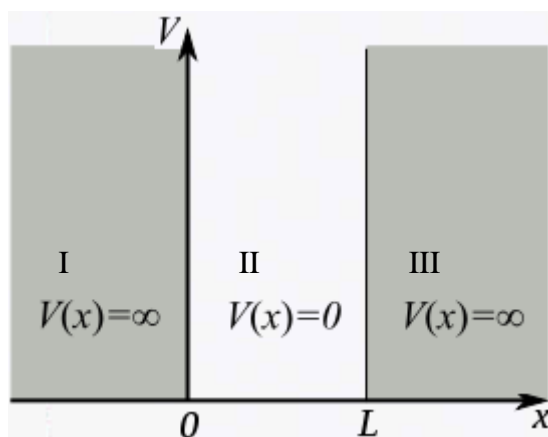
$$\left(-\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j;i \neq j} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \right) \Psi = E\Psi$$

Řešením Schrödingerovy rovnice je vlnová funkce a energie. Přesné analytické řešení Schrödingerovy rovnice je však bohužel možné jen pro několik nejjednodušších systémů. Mezi nejvýznamnější modelové

systemy, pro které je Schrödingerovu rovnici možné řešit přesně, patří volná částice, jednorozměrná a trojrozměrná nekonečně hluboká pravoúhlá potenciálová jáma, jednorozměrná konečně hluboká pravoúhlá potenciálová jáma, jednorozměrná pravoúhlá potenciálová bariéra, lineární a trojrozměrný harmonický oscilátor, tuhý rotátor, pole centrálních sil a atomy vodíkového typu. V případě složitějších systémů je potřeba Schrödingerovu rovnici řešit numericky nebo použít přibližné metody.

Částice v jednorozměrné nekonečně hluboké pravoúhlé potenciálové jámě

Představme si částici o hmotnosti m pohybující se po ose x s počátkem v bodě 0 . Předpokládejme, že potenciální energie je v intervalu $(0,L)$ nulová a mimo tento interval roste do nekonečna. Graf závislosti potenciální energie V na x -ové souřadnici částice pak má tvar nekonečně hluboké pravoúhlé jámy:



Vně jámy, tj. v oblastech I a III, se částice nemůže vyskytovat, musela by totiž mít nekonečně velkou potenciální energii. Pravděpodobnost nalezení částice vně jámy je tedy 0 . Hustota pravděpodobnosti je podle Bornovy pravděpodobnostní interpretace (viz výše) rovna integrálu z druhé mocniny vlnové funkce.

Vně jámy, tj. v oblastech I a III, tedy platí:

$$\int |\Psi(x)|^2 dx = 0$$

Proto

$$\Psi(x) = 0$$

Budeme tedy řešit časově nezávislou Schrödingerovu rovnici pro oblast II. Protože jde o jednorozměrný problém, z výrazu pro laplacián (viz výše) zůstane jen druhá derivace podle x , a protože v oblasti II je potenciální energie nulová, operátor potenciální energie ze Schrödingerovy rovnice zmizí:

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

Rovnici nyní upravíme:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = E\Psi(x) \quad / \cdot \left(-\frac{2m}{\hbar^2}\right)$$

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E\Psi(x) \quad / + \frac{2m}{\hbar^2} E\Psi(x)$$

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\Psi(x) = 0 \quad / \frac{2m}{\hbar^2} E = k^2$$

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

Obečné řešení této diferenciální rovnice lze zapsat ve tvaru

$$\Psi(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}$$

kde c_1 a c_2 jsou blíže neurčená komplexní čísla. Platí

$$e^{ikx} = \cos(kx) + i \sin(kx)$$

$$e^{-ikx} = \cos(kx) - i \sin(kx)$$

Z toho vyplývá

$$\Psi(x) = c_1 \cos(kx) + c_1 i \sin(kx) + c_2 \cos(kx) - c_2 i \sin(kx) = (c_1 + c_2) \cos(kx) + (c_1 - c_2) i \sin(kx)$$

$$\Psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$$

Vlnová funkce je spojitá, proto v bodě $x = 0$ musí platit

$$\Psi(0) = A \cos(k0) + B \sin(k0) = A = 0 \Rightarrow$$

$$\Psi(x) = B \sin(kx)$$

V bodě $x = L$ musí platit

$$\Psi(L) = B \sin(kL) = 0$$

Z toho vyplývá

$$kL = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \cdot L = \pi n$$

kde přirozené číslo $n \in \{1, 2, \dots\}$ je kvantové číslo. Energie částice v jámě je tedy kvantována

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

Pro vlnovou funkci platí

$$\begin{aligned} \Psi(x) = B \sin(kx) &= B \sin\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \cdot x\right) = B \sin\left(\sqrt{\frac{2m \hbar^2 \pi^2 n^2}{\hbar^2 2mL^2}} \cdot x\right) = B \sin\left(\sqrt{\frac{\pi^2 n^2}{L^2}} \cdot x\right) \\ \Psi(x) &= B \sin\left(\frac{\pi n}{L} \cdot x\right) \end{aligned}$$

Víme, že částice se musí nacházet v jámě. Pravděpodobnost nalezení částice v jámě je tedy rovna 1. Hustota pravděpodobnosti je podle Bornovy pravděpodobnostní interpretace (viz výše) rovna integrálu z druhé mocniny vlnové funkce. Uvnitř jámy tedy platí:

$$1 = \int_0^L |\Psi(x)|^2 dx = \int_0^L B^2 \sin^2\left(\frac{\pi n}{L} \cdot x\right) dx = B^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{\pi n}{L} \cdot x\right) dx$$

Platí

$$\cos\left(\frac{2\pi nx}{L}\right) = \cos^2\left(\frac{\pi nx}{L}\right) - \sin^2\left(\frac{\pi nx}{L}\right) = 1 - \sin^2\left(\frac{\pi nx}{L}\right) - \sin^2\left(\frac{\pi nx}{L}\right) = 1 - 2 \sin^2\left(\frac{\pi nx}{L}\right)$$

Z toho vyplývá

$$\sin^2\left(\frac{\pi nx}{L}\right) = \frac{1 - \cos\left(\frac{2\pi nx}{L}\right)}{2} = \frac{1}{2} - \frac{\cos\left(\frac{2\pi nx}{L}\right)}{2}$$

a z toho vyplývá

$$1 = \int_0^L |\Psi(x)|^2 dx = B^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{\pi n}{L} \cdot x\right) dx = B^2 \int_0^L \left(\frac{1}{2} - \frac{\cos\left(\frac{2\pi n x}{L}\right)}{2}\right) dx = \frac{B^2}{2} \int_0^L \left(1 - \cos\left(\frac{2\pi n x}{L}\right)\right) dx$$
$$= \frac{B^2}{2} \int_0^L dx - \frac{B^2}{2} \int_0^L \cos\left(\frac{2\pi n x}{L}\right) dx$$

Nyní zavedeme substituci

$$u = \frac{2\pi n}{L} \cdot x$$

Z toho vyplývá

$$du = \frac{2\pi n}{L} dx$$

z toho vyplývá

$$dx = \frac{L}{2\pi n} du$$

z toho vyplývá

$$\int \cos\left(\frac{2\pi n}{L} \cdot x\right) dx = \int \cos u \cdot \frac{L}{2\pi n} du = \frac{L}{2\pi n} \int \cos u \cdot du = \frac{L}{2\pi n} \sin u = \frac{L}{2\pi n} \sin\left(\frac{2\pi n}{L} \cdot x\right)$$

z toho vyplývá

$$1 = \int_0^L |\Psi(x)|^2 dx = \frac{B^2}{2} \int_0^L dx - \frac{B^2}{2} \int_0^L \cos\left(\frac{2\pi n x}{L}\right) dx = \frac{B^2}{2} [x]_0^L - \frac{B^2}{2} \frac{L}{2\pi n} \left[\sin\left(\frac{2\pi n}{L} \cdot x\right)\right]_0^L =$$
$$= \frac{B^2}{2} (L - 0) - \frac{B^2 L}{4\pi n} \left(\sin\left(\frac{2\pi n}{L} \cdot L\right) - \sin\left(\frac{2\pi n}{L} \cdot 0\right)\right) = \frac{B^2}{2} L - \frac{B^2 L}{4\pi n} (\sin(2\pi n) - \sin 0) =$$
$$= \frac{B^2}{2} L - \frac{B^2 L}{4\pi n} (0 - 0) = \frac{B^2}{2} L - \frac{B^2 L}{4\pi n} \cdot 0 = \frac{B^2}{2} L$$

a z toho vyplývá

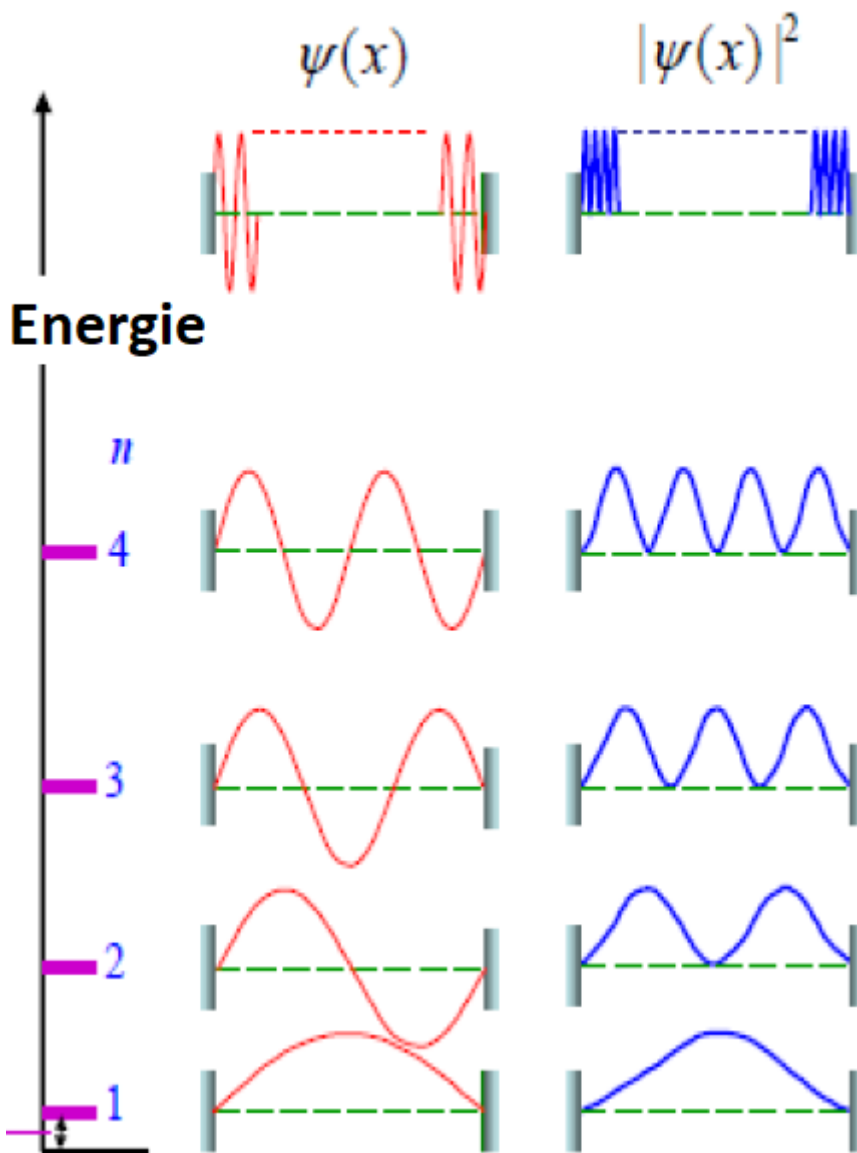
$$B = \sqrt{\frac{L}{2}}$$

Pro vlnové funkce částice v jednorozměrné nekonečně hluboké pravoúhlé potenciálové jámě tedy platí

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{L}{2}} \sin\left(\frac{\pi n}{L} \cdot x\right)$$

kde přirozené číslo $n \in \{1, 2, \dots\}$ je kvantové číslo.

Energetické hladiny pro částici v jednorozměrné nekonečně hluboké pravoúhlé potenciálové jámě, grafy příslušných vlnových funkcí a grafy hustot pravděpodobnosti pro první čtyři kvantová čísla a jsou na následujícím obrázku. Za pozornost stojí, že s rostoucím kvantovým číslem roste i počet tzv. uzlových bodů, tj. bodů mezi stěnami jámy, kde je vlnová funkce rovna nule. Pro každé kvantové číslo n má vlnová funkce $n - 1$ uzlových bodů.



V případě, že jáma není nekonečně hluboká, tj. v případě, že potenciální energie má vně jámy konečnou hodnotu V , vlnová funkce, a tudíž i hustota pravděpodobnosti nalezení částice vně jámy jsou i v případě, kdy je potenciální energie částice menší než V , nenulové. Tento jev se nazývá **tunelování**. Říkáme, že částice s energií menší než V se ven z jámy protunelovala.

