Cvičení ÚDKM 17. 3. 2022 (5. cvičení)

Témata:

- částice v nekonečně a konečně hluboké potenciálové jámě
- potenciálový schod
- potenciálový val (aneb tunelování)

Částice v nekonečné potenciálové jámě

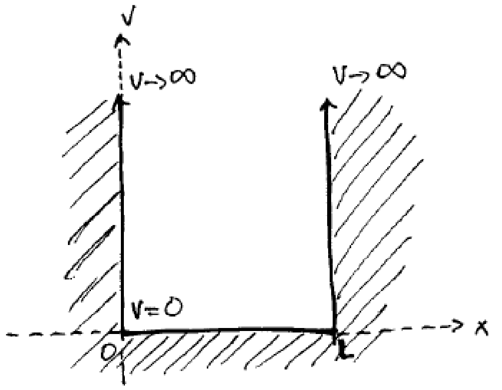

Figure 1: Potenciálová jáma nekonečné hloubky

Typickým příkladem při prvním seznámení s kvantovou mechanikou je příklad tzv. částice v krabici. Uvažujme pro jednoduchost jen jeden rozměr. Naše "krabice" (a její tvar) je dána skrze potenciál $V(x)$ (viz obrázek):

- $x \in (-\infty, 0)$: $V(x) = \infty$,
- $x \in (0, L)$: $V(x) = 0$,
- $x \in (L, +\infty)$: $V(x) = \infty$.

Tedy částice se může vyskytovat pouze v intervalu $(0, L)$, mimo něj se vyskytovat nemůže (potenciál je *nekonečně* vysoký). Naším úkolem je najít možné energetické hladiny a odpovídající vlnové funkce. Řešíme tedy bezčasovou Schrödingerovu rovnici na tomto intervalu s patřičnými okrajovými podmínkami. (I) Jaké jsou okrajové podmínky?

Schrödingerovu rovnici si nejprve upravíme

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi(x)'' - E\psi(x) = 0 \tag{1}$$

$$\psi(x)'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0 \tag{2}$$

$$\psi(x)'' + k^2\psi(x) = 0\,. \tag{3}$$

Řešení tohoto typu rovnice hledáme ve tvaru

$$\psi(x) \approx e^{i\lambda x}\,. \tag{4}$$

Dostaneme tedy

$$\lambda^2 + k^2 = 0 \Rightarrow \lambda = \pm ik \tag{5}$$

a řešení má obecný tvar

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}\,. \tag{6}$$

A a B jsou konstanty, které určíme z okrajových podmínek: vlnová funkce musí totiž na okraji jámy vymizet, tj. pro $x = 0$ a pro $x = L$ musíme dostat $\psi(0) = \psi(L) = 0$. Z první podmínky, tj. $\psi(x = 0) = 0$ dostaneme:

$$\psi(0) = A + B = 0 \Rightarrow A = -B\,. \tag{7}$$

Vzpomenutím si na vztah $\sin x = (\exp(ix) - \exp(-ix))/(2i)$ tak získáme

$$\psi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = N\sin(kx)\,; \tag{8}$$

N je opět konstanta, kterou určíme později. Z druhé okrajové podmínky, $\psi(x = L) = 0$ dostaneme omezení na možné hodnoty vlnového vektoru k:

$$\psi(L) = N \sin(kL) = 0 \Rightarrow k_n = \frac{\pi n}{L}, \quad n = 1, 2, \dots \tag{9}$$

Vlnové funkce n-té hladiny má tedy tvar ((II) dopočtěte normalizační konstantu N)

$$\psi_n(x) = N \sin\left(\frac{\pi x n}{L}\right) \tag{10}$$

a odpovídá energii

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} \,. \tag{11}$$

(III) Zakreslete si vlnové funkce a pravděpodobnosti výskytu, tj. $|\psi_n(x)|^2$.

A na závěr malý početní příklad: Uvažujme, že se částice nachází ve stavu

$$\psi(x) = N \left[\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) + \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\right] \,. \tag{12}$$

(IV) Jedná se o vlastní stav našeho hamiltoniánu?
(V) Určete normovací konstantu N.
(VI) Určete střední hodnotu energie pro tuto částici.

A jak je tomu v trojrozměrném případě?
(VII) Zkuste si odpovědět sami, než budete číst dál.

Potenciál $V(x, y, z)$ je dán analogicky: $V(x, y, z) = 0$ pro $0 \leq x \leq L_x$, $0 \leq y \leq L_y$, $0 \leq z \leq L_z$ a jinak $V(x, y, z) = \infty$. Řešíme tedy, na uvedeném intervalu, trojrozměrnou Schrödingerovu rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z) \,. \tag{13}$$

Problém však můžeme separovat a řešit pro každou proměnnou zvlášť. Což je přesně to, co jsme spočítali výše. Celková energie je pak dána součtem dílčích příspěvků

$$E = E_x + E_y + E_z \tag{14}$$

a vlnová funkce je součinem dílčích funkcí (po dopočtení normalizačního faktoru)

$$\Psi(x, y, z) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(\frac{\pi x n_x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{\pi y n_y}{L_y}\right) \sin\left(\frac{\pi z n_z}{L_z}\right) \,. \tag{15}$$

Vidíme, že se zde setkáváme se degenerací: existují hladiny se stejnou energií, ale různými vlnovými funkcemi; např. hladina E_{112}, E_{121} a E_{211}. Povšimněme si, že základní hladina E_{111} degenerovaná není.

Částice v konečné potenciálové jámě

Uvažujme nyní jámu konečné hloubky V_0 umístěnou od $-L/2$ do $L/2$. Naším úkolem je najít vázané stavy (diskrétní část spektra) uvnitř této jámy.

V tomto případě si musíme prostor rozdělit na tři části:

(I) $x < -L/2$, kde $V(x) = V_0$,
(II) $-L/2 < x < L/2$, kde $V(x) = 0$,
(III) $L/2 < L/2$, kde $V(x) = V_0$.

Schrödingerovu rovnici vyřešíme v každé části zvlášť a poté z požadavku spojitosti vlnové funkce a její derivace (tzv. sešívací podmínky) jednotlivá řešení na sebe navážeme. (I) Napiště tyto podmínky.

V části I. (a III.) řešíme pro $E < V_0$ Schrödingerovu rovnici

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_I(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi_I(x) = 0 \tag{16}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_I(x)}{\mathrm{d}x^2} - \alpha^2\psi_I(x) = 0 \,, \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))} > 0 \,. \tag{17}$$

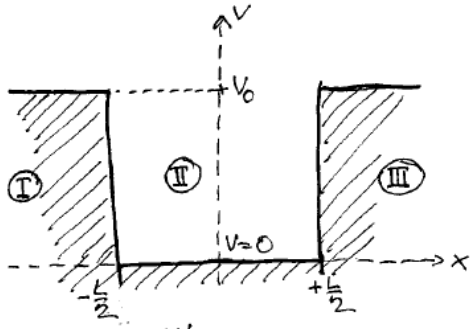

Figure 2: Potenciálová jáma konečné hloubky

Obecné řešení této diferenciální rovnice je

$$\psi_I(x) = A_I e^{\alpha x} + B_I e^{-\alpha x}\,, \tag{18}$$

kde A_I, B_I jsou nějaká komplexní čísla, která určíme posléze z podmínek spojitosti vlnové funkce a její derivace. Kromě toho také požadujeme, aby vlnová funkce vymizela v nekonečnu, tj.

$$\lim_{x\to-\infty} \psi_I(x) = 0\,. \tag{19}$$

Odtud dostaneme, že $B_I = 0$ a řešení v části I. má tvar

$$\psi_I(x) = A_I e^{\alpha x}\,. \tag{20}$$

(II) Zcela analogicky dostaneme pro část prostoru III.

$$\psi_{III}(x) = B_{III} e^{-\alpha x}\,. \tag{21}$$

V části prostoru II. řešíme Schrödingerovu rovnici

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_{II}(x)}{\mathrm{d}x^2} + k^2\psi_{II}(x) = 0\,, \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} > 0\,. \tag{22}$$

Obecné řešení je lineární kombinace sinů a kosinů

$$\psi_{II}(x) = A_{II}\sin(kx) + B_{II}\cos(kx)\,, \quad A_{II}\,, B_{II} \in \mathcal{C}\,. \tag{23}$$

Potenciál je však symetrický a lze ukázat, že vlastní funkce hamiltoniánu musejí být buď sudé ($B_{II}\cos(kx)$), nebo liché ($A_{II}\sin(kx)$).

Podívejme se nejprve na případ sudých řešení.
Pro jednotlivé části prostoru máme

$$\psi_I(x) = A_I e^{\alpha x}\,, \tag{24}$$
$$\psi_{II}(x) = B_{II}\cos(kx) \tag{25}$$
$$\psi_{III}(x) = B_{III} e^{-\alpha x}\,. \tag{26}$$

Vzhledem k symetrii problému musí být $A_I = B_{III} \equiv A$. Podmínky spojitosti vlnové funkce a její derivace nám dávají

$$\psi_{II}(L/2) = \psi_{III}(L/2) \quad : \quad B\cos(kL/2) = Ae^{-\alpha L/2}\,, \tag{27}$$
$$\psi'_{II}(L/2) = \psi'_{III}(L/2) \quad : \quad -kB\sin(kL/2) = -\alpha Ae^{-\alpha L/2}\,, \tag{28}$$

(pro jednoduchost jsme zde označili $B_{II} \equiv B$) čili máme soustavu dvou rovnic pro dvě neznáme A a B

$$Ae^{-\alpha L/2} - B\cos(kL/2) = 0\,, \tag{29}$$
$$\alpha Ae^{-\alpha L/2} - kB\sin(kL/2) = 0\,. \tag{30}$$

Aby tato soutava měla netriviální řešení, musí být její determinant nulový.

$$-Ae^{-\alpha L/2}kB\sin(kL/2) + \alpha Ae^{-\alpha L/2}B\cos(kL/2) = 0 \tag{31}$$
$$ABe^{-\alpha L/2}(-k\sin(kL/2) + \alpha\cos(kL/2)) = 0\,. \tag{32}$$

Hledáme tedy k a α splňující (parametry k, resp. α, které však můžeme vyjádřit pomocí k, nám určují energetické hladiny)

$$-k\sin(kL/2) + \alpha\cos(kL/2) = 0 \Rightarrow \mathrm{tg}(kL/2) = \frac{\alpha}{k} = \sqrt{\frac{V_0 - E}{E}} = \frac{\alpha\hbar}{\sqrt{2mE}}\,. \tag{33}$$

Zároveň platí pro k a α

$$k^2 + \alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}V_0\,, \tag{34}$$

$$(kL)^2 + (\alpha L)^2 = \frac{2m}{\hbar^2}V_0L^2\,, \tag{35}$$

což je rovnice kružnice (osy kL a αL) o poloměru $r = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}V_0L^2}$. Řešení tedy získáme jako průsečíky této kružnice s tangentami (33). (III) Znázorněte řešení graficky. V praxi (při programování hledání řešení) bychom využili nějaké numerické metody.

Pro lichá řešení, $\psi_{II} = A_{II}\sin(kx)$, dostaneme analogicky místo rovnice (33) rovnici

$$-\mathrm{cotg}(kL/2) = \frac{\alpha}{k} = \frac{\alpha\hbar}{\sqrt{2mE}} \tag{36}$$

a opět hledáme průsečíky s (35). (IV) Proveďte řešení pro liché funkce podobně jako je výše pro sudé funkce.

Řešení pro liché a sudé funkce spojíme dohromady. Počet diskrétních hladin N uvnitř jámy je dán počtem průsečíků čtvrtkružnice s tangentami a cotangentami, tj. je dán její poloměrem $r = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}V_0L^2}$ (a ten závisí na konkrétních parametrech dané jámy),

$$(N-1)\pi < r = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}V_0L^2} < N\pi\,. \tag{37}$$

Potenciálový schod (1D)

Při řešení rozptylových problémů nás zajímá, jaká část svazku částic, který dopadá na nějaký potenciál, se odrazí zpět a jaká část projde dál. Klasická analogie této otázky je jednoduchá: Všechny částice s energií vyšší, než je maximum potenciálu, projdou a všechny částice s energií nižší se odrazí. V kvantové mechanice je ale situace složitější: pro obecný potenciál *konečné* výšky *vždy* část částic projde a část se odrazí.

Uvažujme potenciálový schod: pro $x < 0$ je $V(x) = 0$ (A) a pro $x > 0$ je $V(x) = V_0$ (B), viz obrázek. Uvažujme, že svazek částic (vlna) přilétá z $-\infty$, tj. "zleva doprava", a má kinetickou energii E. Podle velikosti energie přílétajícího svazku částic (vlny) rozlišíme dva případy: $E > V_0$ nebo $E < V_0$.

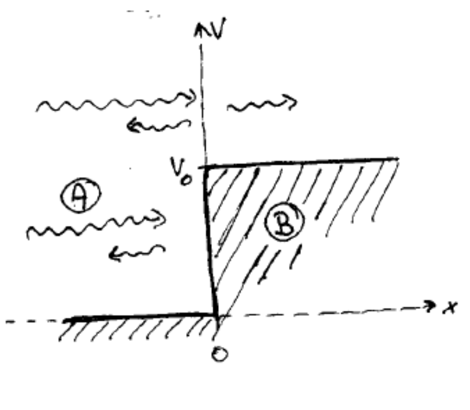

Figure 3: Potenciálový schod

(A) $E > V_0$ = **částečný odraz**

Přilétávající částice má energii vyšší, než je velikost bariéry (tj. "letí nad valem"). V klasické fyzice by pokračovala dál, zatímco při kvantovém popisu nám vyjde nenulová pravděpodobnost odrazu od bariéry.

V poloprostoru A částici popíšeme vlnovou funkcí

$$\psi_A(x) = A_1e^{ik_Ax} + A_2e^{-ik_Ax}\,. \tag{38}$$

První člen, $A_1e^{ik_Ax}$, popisuje přilétávající částici s hybností $p = \hbar k_A$ a druhý člen, $A_2e^{-ik_Ax}$, popisuje odraženou částici s hybností $p = -\hbar k_A$. Zde $k_A = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Podobně pro poloprostor B máme

$$\psi_B(x) = B_1 e^{ik_Bx} + B_2 e^{-ik_Bx} \,. \tag{39}$$

kde první člen, $B_1e^{ik_Bx}$, popisuje částici letící ve směru $+\infty$ (tj. prošlou částice), a druhý člen, $B_2e^{-ik_Bx}$, letící v opačném směru. Dále $k_B = \sqrt{2m\,(E - V_0)\,/\hbar^2}$. Vzhledem k tomu, že předpokládáme, že částice přiléta z $-\infty$, máme $B_2 = 0$.

Pro určení koeficientů A_1, A_2 a B_1, resp. poměrů mezi nimi, využijeme požadavku spojitosti vlnové funkce $\psi(x)$ a její první derivace $\psi'(x)$,

$$\psi_A(0) = \psi_B(0) \,, \tag{40}$$

$$\psi_A'(0) = \psi_B'(0) \,. \tag{41}$$

Pro poměry by mělo vyjít:

$$\frac{A_1}{A_2} = \frac{k_A + k_B}{k_A - k_B} \,, \tag{42}$$

$$\frac{B_1}{A_1} = \frac{2k_A}{k_A + k_B} \,, \tag{43}$$

$$\frac{B_1}{A_2} = \frac{2k_A}{k_A - k_B} \,. \tag{44}$$

(I) Dosaďte do podmínek spojitosti a získejte výrazy pro poměry koeficientů.
Transmisní a reflexní koeficienty jsou definované

$$T = \frac{\text{prošlý tok}}{\text{dopadající tok}} \,, \tag{45}$$

$$R = \frac{\text{odražený tok}}{\text{dopadající tok}} \,, \tag{46}$$

přičemž tok je definovaný

$$j(x) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*(x)\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} - \frac{\mathrm{d}\psi(x)^*}{\mathrm{d}x}\psi(x)\right) = |C|^2\frac{\hbar k_C}{m} \,. \tag{47}$$

(C značí obecně A_1, A_2, B_1.) (II) Dosazením tedy získáme

$$T = \frac{4k_Ak_B}{(k_A + k_B)^2} \,, \tag{48}$$

$$R = \left(\frac{k_A - k_B}{k_A + k_B}\right)^2 \,, \tag{49}$$

a (III) snadno můžeme ověřit, že $R + T = 1$. Z výrazů pro transmisi a reflexy a z definic k_A a k_B vidíme, že pro dostatečně velké energie $E >> V_0$ dostaneme $k_A \approx k_B$, a tedy částice přeletí tento schod, jako by neexistoval.

(B) $E < V_0$ = totální odraz

Nyní uvažujme, že kinetická energie svazku dopadajících částic je nižší než výška potenciálové bariéry. V klasické fyzice by se celý svazek odrazil a letěl by zpět. Jak to vyjde při kvantovém popisu? Postupovat budeme podobně jako v prvním případě.

V poloprostoru A popíšeme částici vlnovou funkcí (zcela stejně jako v prvním případě)

$$\psi_A(x) = A_1 e^{ik_Ax} + A_2 e^{-ik_Ax} \,. \tag{50}$$

První člen, $A_1e^{ik_Ax}$, opět popisuje přilétávající částici s hybností $p = \hbar k_A$ a druhý člen, $A_2e^{-ik_Ax}$, popisuje odraženou částici s hybností $p = -\hbar k_A$. Zde opět $k_A = \sqrt{2mE/\hbar^2}$.

Pro poloprostor B ale nyní máme

$$\psi_B(x) = B_1 e^{ik_Bx} + B_2 e^{-ik_Bx} \tag{51}$$

s $k_B = \sqrt{2m\,(E - V_0)\,/\hbar^2}$. Jelikož je žádoucí mít pod odmocninou kladnou veličinu a komplexní jednotku i vytknout dopředu, běžně se zavádí značení

$$\psi_B(x) = B_1 e^{-\rho_Bx} + B_2 e^{\rho_Bx} \,, \tag{52}$$

kde $\rho_B = -ik_B = -i\sqrt{2m\,(E-V_0)\,/\hbar^2} = \sqrt{2m\,(V_0-E)\,/\hbar^2}$. První člen, $B_1 e^{-\rho_B x}$, popisuje částici letící ve směru $+\infty$ a druhý člen, $B_2 e^{\rho_B x}$, popisuje částici šířící se doleva. Vzhledem k tomu, že svazek přichází z $-\infty$ a že pro $x \to \infty$ má být pravděpodobnost výskytu částice nulová, dostaneme $B_2 = 0$.

Z požadavku spojitosti vlnové funkce a její první derivace opět odvodíme (IV) vztahy pro koeficienty A_1, A_2 a B_1 a (V) následně spočítáme reflektivitu R a transmisi T. Mělo by vyjít $R = 1$ (a $T = 0$). Proč?

(VI) Zakreslete do grafu pravděpodobnost transmise a reflexe.

Dostali jsme tedy stejný výsledek jako v klasické mechanice. Je tu však důležitý rozdíl oproti klasické teorii. Částice částečně do bariéry proniká jako evanescentní vlna, dostaneme tedy nenulovou pravděpodobnost výskytu částice v bariéře (což při klasickém popisu je zakázané). Pravděpodobnost však exponencielně klesá a stane se zanedbatelnou pro x za "dosahem" evanescentní vlny. Pokud by bariéra měla konečnou šířku, částice by se mohla protunelovat skrz ní (viz bonusový úkol).

Povinné úlohy na příště

1. (1 b.) Částice v nekonečné potenciálové jámě: Uvažujte pravoúhlou jámu symetrickou podle počátku, tj. $V(x) = 0$ na intervalu $(-L/2, +L/2)$ a jinak $V(x) = \infty$ a najděte vlastní funkce a energie.
2. (1 b.) Částice v nekonečné potenciálové jámě: Uvažujme, že se částice nachází ve stavu
$$\psi(x) = N\left[\sin\!\left(\frac{3\pi x}{L}\right) - \sin\!\left(\frac{\pi x}{L}\right)\right]. \tag{53}$$
Určete normovací konstantu N. Určete střední hodnotu energie (hamiltoniánu) pro tuto částici. Určete pravděpodobnost, že se částice nachází (a) v levé polovině jámy, tj. $0 < x < L/2$, a (b) v intervalu $L/4 < x < 3L/4$.

Bonusová úloha: Kvantové tunelování

Od potenciálového schodu nyní přejdeme k potenciálovému valu (bariéra konečné výšky a šířky) a ukážeme si jev, který v klasické fyzice analogii nemá - kvantové tunelování.

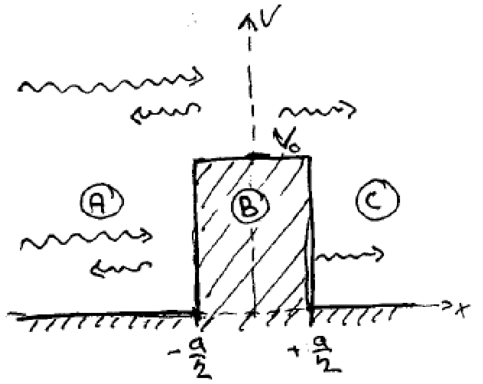

Figure 4: Potenciálový val

Uvažujme potenciálovou bariéru šířky a a výšky V_0 (viz nákres). Předpokládejme, že svazek částic přiléta opět z $-\infty$. Vyjádřete transmisní koeficient T, když kinetická energie přilétávajícího svazku je (a) vyšší než V_0 a (b) nižší než V_0.

Nápověda pro postup: rozdělte si prostor na podprostory, napište odpovídající vlnové funkce, uvažte okrajové podmínky a odvoďte výraz pro T.

Mělo by vyjít:
pro (a)
$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k_A}{k_B} - \frac{k_B}{k_A}\right)^2 \sin^2(k_B a)}, \tag{54}$$
pro (b) ($k_B = i\rho_B$)
$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k_A}{\rho_B} + \frac{\rho_B}{k_A}\right)^2 \sinh^2(\rho_B a)}. \tag{55}$$