

Kvantová mechanika pre mikroelektroniku

Peter Ballo

August, 2010

Obsah

1	Úvod	2
2	Dualizmus korpuskulárnych a vlnových vlastností	4
3	Pohybová rovnica vlno-častice	10
4	Poloha a hybnosť kvantovo-mechanickej častice	19
5	Interakcia vlno-častice s potenciálom	30
6	Pohybujúci sa vlnový balík	42
7	Kvaziklasické priblíženie - WKB aproximácia	49
7.1	Presnejšie odvodenie WKB priblíženia	51
7.2	Porovnanie presného a približného (WKB) riešenia	55
8	Záver	61

Kapitola 1

Úvod

Na konci 19. storočia prežívala klasická fyzika tvorená newtonovou mechanikou, termodynamikou a elektrodynamikou obdobie najväčšieho rozmachu. Výsledky zobecnené v teoretickej fyzike vznikali počas dlhého obdobia pozorovania a zovšeobecňovania javov okolo nás. Autori klasickej fyziky boli patrične hrdí na výsledky získané koncom storočia a niekoľko nenápadných experimentov zameraných na objasnenie podstaty svetla a elektrického prúdu vo vákuu zo začiatku nebral nik veľmi vážne. Podrobnejším skúmaním vlastností svetla, rádioaktivity alebo novo objavenej častice elektrón fyzici narazili na vážne nedostatky do vtedy tak dokonalej klasickej fyziky.

Postupným skladaním výsledkov experimentálnych faktov z mikrosвета vzniká nový druh mechaniky pri ktorej sa energia šíri v presne určených kvantách. Práve táto fascinujúca vlastnosť "novej" fyziky dala teórii opisujúcej vlastnosti mikrosвета názov - "Kvantová mechanika". Dnes je základom teórie tuhých látok, polovodičov, dielektrík, kovov, kvapalín pri nízkych teplotách, teóriou chemickej väzby i chemických reakcií, základom teórie atómových jadier a elementárnych častíc. V súčasnosti je súčasťou teoretického základu mnohých technických disciplín, jadrovej energetiky, chémie, elektroniky, mikrovlnnej techniky, optoelektroniky a laserovej techniky, nukleárnej medicíny, celej palety diagnostických metód analýzy štruktúry i chemizmu materiálov a pod.

Tento text stručne sumarizuje dejiny kvantovej mechaniky a poukazuje na jej príbuznosť s optikou. Cieľom je objasniť základné pojmy a princípy kvantovej mechaniky, ktoré je nevyhnutné poznať pre správne chápanie javov a skutočností využívaných v technických disciplínach vychádzajúcich najmä z fyziky tuhých látok. Autori si nekladú za cieľ podrobne rozobrať teóriu kvantovej mechaniky. Za tým účelom bolo napísaných množstvo veľmi kvalitných učebníc vo všetkých svetových jazykoch ako aj v slovenčine. Učebný text je určený študentom, ktorí budú využívať výsledky a princípy kvan-

tovej mechaniky v technických aplikáciách. Preto sme sa zamerali hlavne na "priamočiary" pohyb mikroskopických častíc, a ich interferenciu s potenciálovou bariérou, pretože to je hlavná oblasť aplikácie kvantovej mechaniky v mikroelektronike.

Kapitola 2

Dualizmus korpuskulárnych a vlnových vlastností

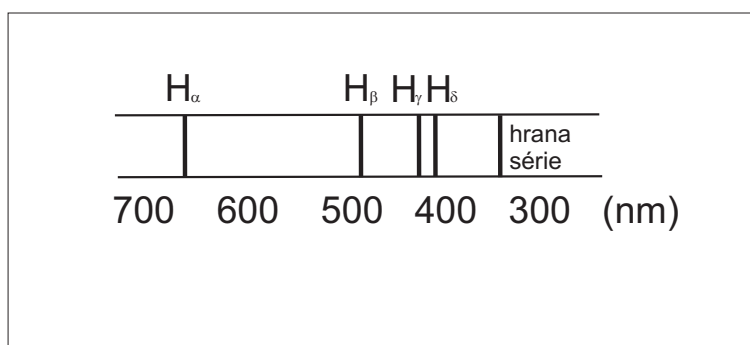
Anjel môže postupne opúšťať miesto, na ktorom bol skôr, delitelne a tak jeho pohyb bude súvislý. Môže zároveň opustiť celé miesto a objaviť sa naraz v celku na druhom mieste, a tak jeho pohyb bude nesúvislý. A tak anjel v jednom okamžiku môže byť na jednom mieste a v inom okamžiku na inom mieste, bez toho aby bol nejaký čas v mieste prostrednom.

(Tomáš Akvinský 1268)

Koncom 19. storočia bola väčšina prírodovedcov presvedčená, že pomocou rozvinutých disciplín klasickej fyziky, predovšetkým teoretickej mechaniky, teórie elektromagnetického poľa a termodynamiky možno opísať všetky známe fyzikálne deje. Další pokrok v teoretickej fyzike videli v spresňovaní meraní a ich aplikácie do technickej praxe. Napriek tomuto presvedčeniu, už v predchádzajúcich storočiach existovali optické experimenty, ktoré nenápadne budovali cestu novej fyzike, ktorá kraľovala v 20. storočí.

Isaac Newton v roku 1666 pomocou jednoduchého skleneného hranola rozložil slnečné žiarenie do farebných plôch, ktoré nazval *spektrum*. Tieto efekty boli známe aj skôr, ale Newton ako prvý správne vysvetlil ich podstatu a položil tak základy spektroskopie. Josef Fraunhofer - génus experimentu, v roku 1823 zostrojil prvú optickú mriežku, tvorenú sklenenou doštičkou s veľkým počtom vrypov (niekoľko sto na milimeter) vyrytých pomocou jemného diamantového hrotu. Takto vytvorená optická mriežka rozkladá slnečné svetlo podobne ako sklenený hranol, avšak s možnosťou presného určenia vlnovej dĺžky jednotlivých zložiek spektra. Pozorovaním slnečného žiarenia zistil, že vzniknuté spektrum nie je spojité, ale sa skladá z veľkého počtu izolovaných čiar navzájom oddelených tmavými plochami. Fraunhofer ne-

mal pochopiteľne predstavu o pôvode tmavých plôch medzi čiarami, a keď aj nejakú mal určite sa s ňou nepochválil, pretože vtedajšia fyzika svetla, žiadne nespojitosti v spektre slnečného žiarenia nepripúšťala. V druhej polovici 19. storočia Johann Jakob Balmer, švajčiarsky stredoškolský profesor, robil pokusy s vyžarovaním rozhorúčeného plynného vodíku. Vo viditeľnom spektre sa ukazovali štyri veľmi presne ohraničené čiary, ktoré nazval H_α (jasne červená), H_β (bledo modrá), H_γ (modrá), H_δ (tmavo modrá). Podrobným skúmaním celého spektra sa našli ďalšie čiary v ultrafialovej (teda voľným okom nepozorovateľnej) oblasti. Poloha čiar sa zahusťuje tak, že žiadna nemá kratšiu vlnovú dĺžku ako 364,7nm. Tejto hodnote hovoríme hrana série. Polohu čiar vo viditeľnej oblasti aj ultrafialovej oblasti možno vidieť na obrázku 2.1.



Obr. 2.1: Poloha jednotlivých čiar v spektre Balmerovej série. Vo viditeľnej oblasti spektra sa nachádzajú čiary $H_\alpha - H_\delta$. Spektrálne čiary na ľavo od H_δ sa nachádzajú v ultrafialovej oblasti a boli pozorované neskôr.

V roku 1885 sa Balmerovi podaril nájsť vzťah, ktorý veľmi presne popisuje polohy čiar v spektre vodíkového plynu. Podľa tohoto vzťahu sa obrátené vlnové dĺžky (vlnočty) prislúchajúce jednotlivým čiaram spektra, v Balmerovej sérii, dajú jednoducho vypočítať:

$$\frac{1}{\lambda} = R_\infty \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (2.1)$$

kde: $n = 3, 4, 5, 6, \dots$

Jasne červenej čiare H_α s vlnovou dĺžkou $\lambda = 656,28 \text{ nm}$ zodpovedá $n=3$, bledo modrej čiare H_β s vlnovou dĺžkou $\lambda = 486,13 \text{ nm}$ zodpovedá $n=4$ a tak ďalej. Konštanta R_∞ sa nazýva Rydbergova konštanta ktorej experimentálne zistená hodnota je $1096,77 \text{ m}^{-1}$. Krátko po uverejnení Balmerovho vzorca na výpočet vlnových dĺžok našiel Lyman podobnú sériu v ďalekej ultrafialovej oblasti. Ďalšie série boli objavené v infračervenej oblasti. Spoločným

znakom polôh spektrálnych čiar je že zodpovedajúce vlnové dĺžky sú určené zobecneným Balmerovým vzťahom:

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) \quad (2.2)$$

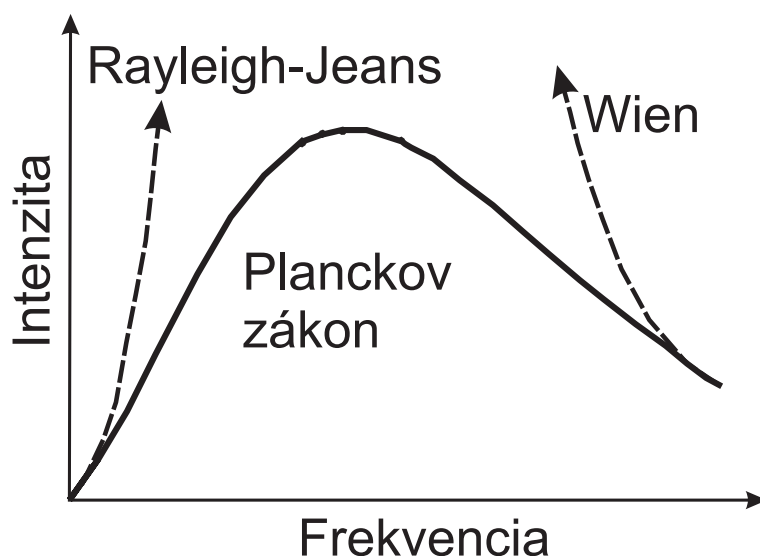
kde $n_2=1$ zodpovedá Lymanovej sérii, $n_2=2$ zodpovedá Balmerovej sérii (tvar pôvodne objaveného Balmeroveho vzťahu), $n_2=3$ zodpovedá Paschenovej sérii a $n_2=4$ zodpovedá Brackettovej sérii. Pre každú objavenú sériu sa n_1 pohybuje od n_2+1 (prvá čiara) až do nekonečna (hrana série). Aj keď sa tieto výsledky nedali interpretovať pomocou klasickej teórie elektromagnetického žiarenia, nevzbudili z počiatku veľkú pozornosť. Na skutočnú katastrofu si bolo treba ešte niekoľko rokov počkať. Ako všetky revolúcie, aj táto sa začala nenápadne.

Roku 1860 Gustav Robert Kirchhoff postuloval zákon, podľa ktorého pomer spektrálnej hustoty energie žiarenia nezávisí od druhu žiarenia. (Jednoducho povedané ak niektoré teleso pri teplote T viac žiarenia vyžaruje potom aj viac žiarenie pohlcuje.) Roku 1879 Josef Stefan uverejnil výsledky experimentov, podľa ktorých intenzita žiarenia z povrchu rôznych telies je úmerná štvrtej mocnine rozdielu teplôt. Roku 1884 Ludwig Boltzmann teoreticky zdôvodnil tento výsledok aj pre absolútne čierne teleso použitím klasickej Maxwellovej teórie elektromagnetického poľa. Posledný krok v klasickej teórii vyžarovania urobil Wilhelm Wien v roku 1893, keď použitím teórie rovnovážnej termodynamiky odvodil vzťah medzi teplotou T a vlnovou dĺžkou pri ktorej sa vyžaruje maximum energie. Podľa tohto vzťahu platí medzi veličinami jednoduchá relácia:

$$\lambda T = b \quad (2.3)$$

kde b je univerzálna konštanta, ktorú možno ju experimentálne určiť ($b = 2,897 \times 10^{-3} \text{mK}$). Až sem vyzeralo všetko v úplnom poriadku čo len potvrdzovalo myšlienku skončenia pokroku vo fyzike.

Okolo roku 1890 sa podujala dvojica experimentátorov Lummer a Pringsheim v sérii veľmi presných experimentov potvrdiť správnosť klasickej fyziky v oblasti vyžarovania. Za tým účelom vyrobili absolútne čierne teleso (vyžaruje len vlastné svetlo) tak, že povrch nahradili dutinou v tmavom materiály. V širokom intervale teplôt merali spektrálnu hustotu vyžarovania energie z dutiny - teda aké množstvo energie sa vyžiari v intervale vlnových dĺžok $(\lambda, \lambda + \Delta\lambda)$. Experimentálne údaje ukázali, že tvar vyžarovacej krivky závisí len od teploty. Na obrázku 2.2. sú nakreslené vyžarovacie krivky pre dve rôzne teploty absolútne čierneho telesa.



Obr. 2.2: Výsledky experimentálneho merania spektrálnej závislosti vyžarovania absolútne čierneho telesa pre jednu teplotu - plná čiara. Prerušovaná čiara predstavuje teoretickú aproximáciu podľa Wiena (vľavo od maxima) a podľa Rayleigha (vpravo od maxima).

Wien pokúsil vysvetliť výsledok Lummer-Pringsheimovho experimentu použitím klasickej teórie termodynamiky, v tom období veľmi všeobecného zákona fyziky. Použitím konkrétnych termodynamických predstáv sa mu podarilo odvodiť vzťah, ktorý veľmi presne aproximoval výsledky experimentu v krátkovlnnej (ultrafialovej oblasti) oblasti. V oblasti experimentálneho (konečného) maxima hustoty vyžarovania však predpovedal nekonečne veľkú hustotu vyžiarenej energie. Iné vysvetlenie ponúkol John William Strutt Lord Rayleigh, ktorý predpokladal, že žiarenie čierneho telesa sa dá opísať ako stojaté vlnenie v uzavretej dutine. Použijúc takýto model určil, aký počet rôznych vĺn pripadne na interval vlnových dĺžok $\lambda, \lambda + \Delta\lambda$ a každej priradil podľa princípov štatistickej fyziky, vypracovanej Boltzmannom, energiu je Boltzmannova konštanta. Takto veľmi dobre aproximoval výsledky experimentu pre dlhovlnné priblíženie. Rovnako ako v predchádzajúcom modeli, v oblasti konečného maxima hustoty vyžarovania, predpovedaná hustota divergovala do nekonečna. Okolo roku 1900 sa preto fyzici začali zamýšľať, či skutočne je v klasickej teoretickej fyzike všetko v poriadku. V tejto súvislosti začali niektorí hovoriť o ultrafialovej katastrofe.

Na zasadnutí Nemeckej fyzikálnej spoločnosti, ktoré sa konalo 14. decembra 1900, (iba niekoľko dní pred koncom 19. storočia) odznela prednáška

Max Plancka na tému "Radiálne vyžarovanie čierneho telesa" na ktorej prvýkrát verejne postuloval vyžarovací zákon a vyslovil predpoklad (na tú dobu nepochybne nesmierne odvážny), že energia existuje v nespojitej forme a šíri sa vo forme izolovaných kvant energie. Na svoje tvrdenie mal však veľmi silný argument. Keď použil "kvantovanie energie" pri výpočte spektrálneho rozdelenia hustoty vyžarovania absolútne čierneho telesa, dospel k výbornej zhode s experimentom v celom vyžarovacom spektre, čo sa do tej doby nikomu nepodarilo. Zároveň ukázal, že zhodu s experimentom možno dosiahnuť, len ak "nastavíme" hodnotu jedného kvanta energie na určitú hodnotu. Tá je síce malá, ale presne určená z experimentu a po mnohých spresneniach (nie veľmi podstatných - v roku 1900 jej hodnotu Max Planck určil na $6,55 \times 10^{-27} \text{ erg.s} = 6,55 \times 10^{-34} \text{ J.s}$) ju dnes definujeme:

$$h = 6,62606 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \quad (2.4)$$

Túto konštantu voláme Planckova konštant a tvorí fundamentálnu konštantu používanú vo fyzike.

Koncom 19. storočia Heinrich Herz objavil efekt, pri ktorom sa v dôsledku dopadu svetla na povrch kovovej doštičky emitujú elektróny. Herz tento jav nazval fotoefekt, neskôr pribudol prívlastok vonkajší fotoefekt, aby sa odlíšil od podobného javu v polovodičoch. Veľmi starostlivým premeriavaním vonkajšieho fotoefektu sa ukázalo, že existuje istá hraničná frekvencia (farba) dopadajúceho svetla, pod ktorou už efekt uvoľňovania elektrónov nenastáva. Hraničná frekvencia závisí od druhu osvetľovaného materiálu. Keď sa na osvetlenie povrchu kovovej doštičky použije svetlo vyššej frekvencie, ako je hraničná potom rozdelenie energie vyletujúcich elektrónov závisí len od vlnovej dĺžky použitého svetla a nezávisí od intenzity svetla. Podľa klasickej teórie elektromagnetického poľa (James Clerk Maxwell - 1855) svetlo interaguje so všetkými elektrónmi na povrchu ako spojitá vlna a podmienky hraničného stavu musia závisieť od intenzity a nie od frekvencie - teda v úplnom rozpore s pozorovaním. Treba poznamenať, že v iných experimentoch klasická teória elektromagnetického poľa ukazuje výbornú zhodu s experimentom.

Vysvetlenie tohto javu podal Albert Einstein v roku 1905 pomocou Planckovej hypotézy o kvantovaní energie. Podľa Einsteinovej predstavy energia dopadajúceho žiarenia je priamoúmerná frekvencii:

$$E = h\nu \quad (2.5)$$

kde h je Planckova konštant a ν je frekvencia dopadajúceho žiarenia. Energii vyletujúcich elektrónov treba zmenšiť o energiu A potrebnú na uvoľ-

nenie elektrónu z povrchu kovu (výstupná práca). Kinetická energia vyletujúcich elektrónov je potom rovná

$$E_k = h\nu - A \quad (2.6)$$

Ak je frekvencia dopadajúceho žiarenia menšia ako hraničná, potom je energia žiarenia menšia ako výstupná práca a elektróny nedokážu opustiť povrch kovu. Význam vysvetlenia fotoelektrického javu je v poznaní, že elektromagnetické pole sa šíri v kvantách (fotónoch) a že tieto kvantá sú charakterizované energiou. V roku 1921 bola Albertovi Einsteinovi za toto vysvetlenie udelená Nobelova cena - nie za teóriu relativity, ako sa niekedy chybne uvádza.

V roku 1920 Arthur Holly Compton v sérii veľmi presných experimentov s rozptylom röntgenového žiarenia na kryštále zistil, že rozptýlené žiarenie je absorbované viac ako by malo byť podľa klasických predstáv. Na vysvetlenie tohto javu si Compton urobil pracovnú hypotézu, že rozptýlené žiarenie má väčšiu vlnovú dĺžku ako žiarenie dopadajúce. Táto hypotéza protirečila teórii podľa ktorej sa pri rozptyle vlnová dĺžka žiarenia nemení. Compton sa neuspokojil s pracovnou hypotézou, a ani ju nemohol veľmi propagovať vzhľadom na protirečenie s teóriou. Najskôr sa pokúšal uviesť do súladu výsledky experimentu s teóriou aplikovaním Dopplerovho efektu. Jednoduchý výpočet však ukázal, že v takomto prípade by sa museli elektróny pri rozptyle kolektívne pohybovať jedným smerom polovičnou rýchlosťou svetla. Tým by sa indukovali obrovské prúdy, ktoré by kryštál roztavili. To sa samozrejme nepozorovalo. Na základe vysvetlenia vonkajšieho fotoefektu, prišiel Compton na myšlienku, že jednotlivý fotón prichádzajúceho žiarenia interaguje práve s jedným elektrónom v rozptylujúcom kryštále. Potom už len aplikoval zákony zachovania energie a hybnosti a dostal výbornú zhodu s experimentom. V dôsledku tejto myšlienky priradil fotónu popri energii aj hybnosť. V roku 1927 bola priekopnícka myšlienka Arthura H. Comptona ocenená Nobelovou cenou. Tak po rokoch tápania medzi vlnovou a časticovou podstatou svetla bolo uzavreté, že pravdu majú obe strany - fotón je "častica" aj "vlna" zároveň. Táto pozoruhodná vlastnosť vlnno-častice v budúcnosti zkomplikuje odvodenie pohybovej rovnice a zavedie do fyziky "nenázornosť". Ale to je už iné rozprávanie.

Kapitola 3

Pohybová rovnica vlnno-častice

V roku 1897 uverejnil Joseph John Thomson výsledky experimentov z ktorých vyplývala existencia veľmi ľahkej častice nesúcej elektrický náboj. Paradoxne meno pre túto časticu už existovalo, pretože v roku 1891 Johnstone Stoney navrhol pre elementárny nosič náboja v elektrickom prúde meno **elektrón**. J.J.Thomson bol na svoj objav (za ktorý v roku 1906 dostal Nobelovu cenu) právom hrdý. V neskorších prácach sa preto pokúšal umiestniť novo objavenú časticu - elektrón do iných modelov. Veľmi úspešným bol v tom čase "jeho" model atómu, ako najmensej stavebnej častici sveta. Podľa tohto modelu je kladný náboj rovnomerne rozdelený v objeme gule s polomerom rádovo 10^{-10} m. Elektróny volne plávajú v objeme gule ako hrozienka v pudingu tak, aby celkový náboj atómu bol neutrálny. Aj keď prvotná myšlienka patrí lordovi Kelvinovi, model sa úspešným stal práve vďaka objavu elektrónu a popularite J.J.Tomsona. Dnes, možno trochu neprávom, hovoríme o Thomsonovom modeli.

V období rokov 1906 až 1908 vykonali mladí fyzici Hans Geiger a Ernest Marsden pod vedením Ernsta Rutherforda (Rutherford sa preslávil ešte raz, keď sa stal starým otcom rovnako slávnej speváčky Olivia Newton Johnovej) pokusy s rozptylom α -častíc na tenkej zlatej fólii. Cieľom pokusov bolo potvrdiť (alebo snáď aj vyvrátiť) pravdivosť Thomsonovho modelu atómu. V rámci predpokladov Thomsonovho modelu, experimentátori očakávali malé rozptylové uhly. Na veľké prekvapenie, mnohé z dopadajúcich α -častíc da odrážali späť. Po rokoch prekvapenie experimentátorov popísal Rutherford na jednej prednáške takto. "Efekt odrazenia α častice na atóme konštruovanom na základe Thomsonovho modelu bol asi tak pravdepodobný, ako že sa podarí zachytiť granát vystrelený z 15-palcového (asi 45 centimetrov) lodného dela na tenkom cigaretovom papieriku. Napriek tomu sme ten efekt pozorovali." Rutherfordovi trvalo ešte asi jeden a pol roku, aby prišiel tej záhade na koreň. Na zlatú nedelu v roku 1910 pozval Rutherford a jeho

manželka na večeru niekoľko kolegov, aby im oznámil: "Teraz už viem ako vyzerá atóm." Na večeri sa dozvedeli, že výsledok experimentu možno interpretovať len v tom prípade ak je kladné, tvrdé ale veľmi malé jadro umiestné v strede atómu a elektróny sa pohybujú okolo. O kruhových dráhach sa ešte nehovorilo. Vyplýval z toho neuveriteľný záver, že hmota okolo nás je neuveriteľne prázdna.

Začiatkom roku 1913 navštívil Nielsa Bohra vo fyzikálnom ústave Kordanskej univerzity dávny priateľ zo štúdií Hans Márius Hansen. Tento chcel so svojim spolužiakom prediskutovať problém izolovaných čiar vo vyžarovacích spektrách jednotlivých látok. Od pionierskych čias Balmerových pokusov, pokročila dopredu experimentálna technika, nik však nemal ani potuchy ako tie čiary vznikajú. Niels Bohr sa po niekoľko rokov zamýšľal na tým, ako sa pohybujú atómy okolo jadra v Rutherfordovom modeli. Jeho hypotéza v ktorej predpokladal, že elektróny sa pohybujú po uzavretých dráhach bez toho, aby vyžarovali svoju energiu vo forme elektromagnetického žiarenia, narážala na nedôveru, pretože odporovala teórii elektromagnetického žiarenia. Keď Hans Márius Hansen vytiahol Balmerov vzťah, bolo Bohrovi zrazu všetko jasné. Bolo to ako keď kamienky v skladačke zapadnú na správne miesto a v hlave sa vynorí správny obraz. Jednotlivé čiary vo vyžarovacích spektrách vznikajú pri prechode elektrónov z jednej hladiny na druhú. Na obrázku 3.1. sú znázornené prechody pre jednotlivé série v prípade vodíku.

Teraz už mohol Bohr definovať svoje postuláty a pomocou nich vysvetliť podstatu čiar v emisných spektrách.

Bohrove postuláty

1. Elektróny sa pohybujú okolo kladne nabitého jadra po stabilných kruhových dráhach.

Z podmienky stability atómu musí platiť, predpoklad zachovania celkovej energie, ktorá sa rozdeľuje na kinetickú energiu K a potenciálnu energiu U :

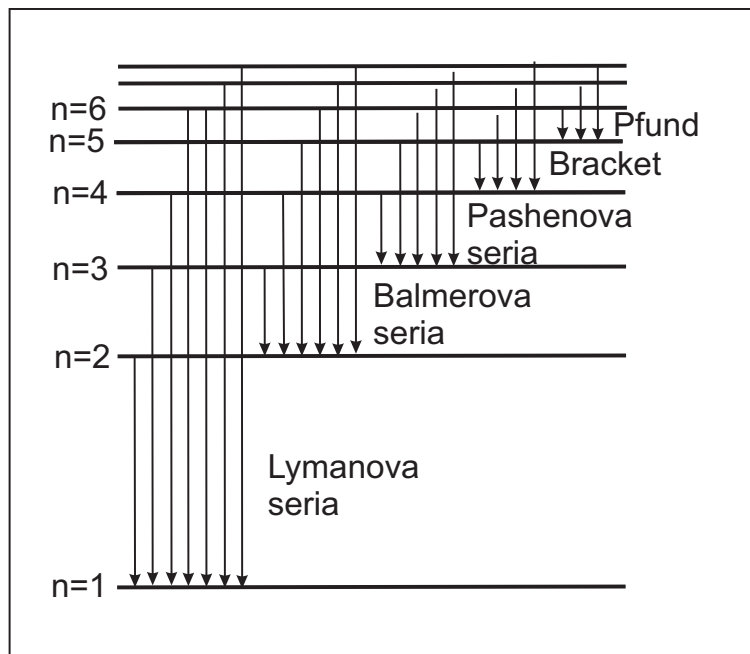
$$H = K + U \quad (3.1)$$

kde pre kinetickú energiu pohybujúceho sa telesa hmotnosti m (v tomto prípade elektrónu) platí:

$$K = \frac{1}{2}mv^2 \quad (3.2)$$

ak predpokladáme, že elektrón sa pohybuje v coulombickom poli kladne nabitého jadra po kružnici polomeru r , pre potenciálnu energiu dostaneme:

$$U = -k \frac{e^2}{r} \quad (3.3)$$



Obr. 3.1: Dovoľené prechody medzi jednotlivými hladinami v atóme vodíku. Vlnové dĺžky jednotlivých čiar veľmi presne popisuje zobecnený Balmerov vzťah.

kde k je konštanta. Príťažlivá coulombická sila f_c medzi jadrom a elektrónom musí byť kompenzovaná odstredivou silou f_o rovnakej veľkosti:

$$f_c = f_o \quad (3.4)$$

po dosadení:

$$k \frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \quad (3.5)$$

a po úprave:

$$k \frac{e^2}{2r} = \frac{1}{2}mv^2 \quad (3.6)$$

Teda z podmienky stability atómu dostaneme pre kinetickú energiu:

$$K = k \frac{e^2}{2r} \quad (3.7)$$

A pre celkovú (väzobnú) energiu:

$$E = -k \frac{e^2}{2r} \quad (3.8)$$

ktorá je záporná čo zaručuje stabilitu atómu a dokazuje platnosť prvého postulátu.

2. Pri pohybe elektrónu okolo jadra sú dovolené len niektoré dráhy. Mimo nich sa elektrón nemôže vyskytovať.

Každej dovolenej dráhe zodpovedá moment hybnosti $L = mvr$, ktorý nadobúda diskkrétne (kvantované) hodnoty:

$$mv_n r_n = n \frac{h}{2\pi} \quad (3.9)$$

kde $n=1,2,3,\dots$, h je Planckova konštanta, r_n sú dovolené polomery orbitálnych dráh. Energetická "vzdialenosť" medzi dvomi dovolenými orbitálnymi dráhami je $h/2\pi$. Keďže tento podiel Planckovej konštanty a dvojnásobku π sa bude často vyskytovať, zavedieme nové označenie:

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (3.10)$$

Vo zŕahu (3.9) vystupujú dve neznáme veličiny r_n a v_n , ktoré spolu súvisia. Aby sme dokázali určiť polomery dovolených dráh, musíme eliminovať rýchlosť:

$$m^2 v_n^2 r_n^2 = n^2 \hbar^2 \quad (3.11)$$

z rovnosti coulombickej a odstredivej sily (rovnica 3.4) dostaneme:

$$v_n^2 = k \frac{e^2}{r_n m} \quad (3.12)$$

Po dosadení do predposledného vzťahu dostaneme:

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{k e^2 m} \quad (3.13)$$

kde $n=1,2,3,\dots$ a nazývame ich **hlavné kvantové čísla**. Vidieť, že s rastúcim hlavným kvantovým číslom sa polomer dovolenej orbitálnej dráhy zväčšuje kvadraticky. Najmenší polomer, ktorý je v stabilnom atóme dovolený, vypočítame, ak položíme $n=1$ a tento polomer označíme ako a_0 :

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{k e^2 m} \quad (3.14)$$

Po dosadení číselných hodnôt dostaneme, že:

$$a_0 = 0.529 \times 10^{-10} m \quad (3.15)$$

tento polomer nazývame Bohrov polomer. Hodnota Bohrovho polomeru sa zdá byť veľmi malá, avšak porovnaná k polomeru atómového jadra ($\sim 10^{-15} m$) je obrovská. Aby sme získali predstavu o veľkosti rozdielu medzi polomerom jadra a polomerom prvej dráhy, predpokladajme "gigantický" model atómu s jadrom o polomere 1 cm. V takomto modeli by sme museli umiestniť elektrón na prvú dráhu vo vzdialenosti 100 metrov. Skutočne sa takto naplnil predpoklad Ernsta Rutherforda o prázdnoti hmoty okolo nás.

Pomerne jednoducho vyjadríme energiu elektrónu a n -tej dráhy použijúc predchádzajúce vzťahy (3.8) a (3.13):

$$E_n = -\frac{k^2 e^4 m}{2n^2 \hbar^2} \quad (3.16)$$

3. Pri prechode z energeticky vyššej hladiny na energeticky nižšiu hladinu sa rozdiel energie vyžiari vo forme elektromagnetického žiarenia, frekvencia ktorého je daná vzťahom:

$$h\nu = E_i - E_j \quad (3.17)$$

kde: ν je frekvencia vyžiarenej elektromagnetickej vlny, a E_j sú energie hladín. Pri prechode z energeticky nižšej hladiny na energeticky vyššiu hladinu sa rozdiel energie absorbuje vo forme elektromagnetického žiarenia zodpovedajúcej frekvencie.

Po dosadení do rovnice (3.17) z rovníc (3.16) a (3.14) dostaneme:

$$h\nu = -\frac{ke^2}{2a_0 n_i^2} - \left(-\frac{ke^2}{2a_0 n_j^2}\right) \quad (3.18)$$

alebo po malej úprave:

$$\nu = \frac{ke^2}{2a_0 h} \left(\frac{1}{n_j^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \quad (3.19)$$

Keďže poloha spektrálnych čiar sa udáva vo vlnovej dĺžke (nie vo frekvencii), posledný vzťah prepíšeme do tvaru pre vlnovú dĺžku (použili sme pri tom vzťah λ):

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_j^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \quad (3.20)$$

kde sme označili:

$$R_H = \frac{ke^2}{2a_0hc} \quad (3.21)$$

Po dosadení číselných hodnôt do vzťahu (3.21) dostaneme:

$$R_H = 1097.3731m^{-1} \quad (3.22)$$

Vypočítaná konštanta R_H zodpovedá experimentálnej Rydbergovej konštante R_∞ vystupujúcej v Balmerovom vzťahu. Zlepšenie výsledku možno dosiahnuť ak uvažujeme o atóme ako sústave dvoch hmotných telies, ktoré obiehajú okolo spoločného ťažiska. Vo vzťahu (2.14) pre výpočet Bohrovho polomeru potom namiesto hmotnosti elektrónu m bude vystupovať redukovaná hmotnosť μ :

$$\mu = \frac{mm_p}{m + m_p} \quad (3.23)$$

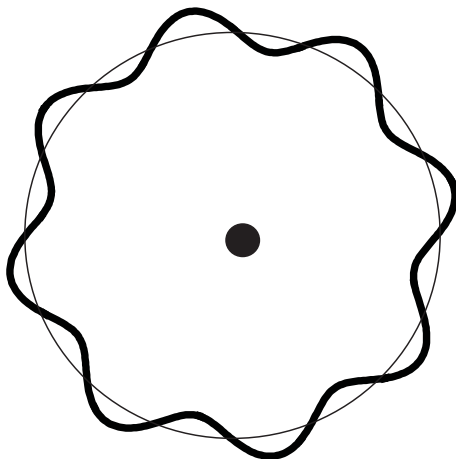
kde m_p je hmotnosť protónu. Zavedenie tejto malej korekcie umožnilo zlepšiť súhlas medzi teóriou a experimentom, tak že vzájomná odchýlka je v medziach experimentálnych chýb použitých konštánt a vlastného merania. Výborný súhlas experimentu s teóriou bol triumf bohrovej teórie a znamenal vstup do novej mechaniky.

Aplikácie troch postulátov Nielsa Bohra priniesli významné výsledky pre vysvetlenie vodíkových emisných spektier. Táto teória však nebola schopná vysvetliť polohu čiar v emisných spektrách héliových a zložitejších atómov. Vďaka tomu, aj napriek nepochybným úspechom, mala táto teória v rokoch 1913 - 1926 mnohých odporcov. Hlavným argumentom bol neobyčajne vysoký počet postulátov - tvrdení bez dôkazu. Hlavne prvý postulát o dovolených dráhach vyvolával pochybnosti. Zdalo sa, že tieto postuláty možno odvodiť z ešte elementárnejších princípov.

V roku 1923 mladý fyzik Louis de Broglie vyslovil revolučnú myšlienku. Ak je pravda, že elektromagnetické vlnenie sa prejavuje duálnym charakterom (teda fotón je zároveň vlna aj častica), potom podobný efekt možno predpokladať aj pre hmotné telesá. Ak teda pripustíme, že elektrón má podobné duálne vlastnosti, ako fotón, pri svojom pohybe okolo jadra sa šíri vo forme vlny, podstata ktorej de Brogiemu zostávala utajená. Na to aby nedochádzalo k interferenčným javom a následnému zániku vlnno-častice, musí sa na obvod orbitálnej dráhy "zmestiť" celistvý počet vĺn, ako je to schematicky naznačené na obrázku 3.2. Nutnou podmienkou stacionárneho n -tého orbitu s polomerom r_n je:

$$2\pi r_n = n\lambda \quad (3.24)$$

kde: λ je vlnová dĺžka hypotetickej vlny, prislúchajúcej obiehajúceho elektrónu.



Obr. 3.2: Schématické znázornenie stojatej vlny na stacionárnom orbitáli vodíkového atómu.

V prípade, že vlna má vlastnosti fotónu, tak energiu na stabilnom orbite možno vyjadriť nasledovne (pomocou Einsteinovej teórie vonkajšieho fotoefektu):

$$E = h\nu \quad (3.25)$$

alebo tiež použijúc závery Einsteinovej špeciálnej teórie relativity:

$$E = mc^2 \quad (3.26)$$

Spojením posledných dvoch rovníc dostaneme:

$$h\nu = mc^2 \quad (3.27)$$

Po malej úprave dostaneme:

$$\frac{c}{\nu} = \frac{h}{mc} \quad (3.28)$$

Ak uvažíme, že relativistická hybnosť $p=mc$ a $\lambda=c/f$ dostaneme fundamentálny (základný) vzťah medzi vlnovou dĺžkou a hybnosťou častice:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (3.29)$$

Ak za λ dosadíme podmienku pre stabilnú orbitálnu dráhu (3.24), potom dostaneme:

$$mvr_n = \frac{nh}{2\pi} \quad (3.30)$$

čo nie je nič iné ako záhadný vzťah vystupujúci v druhom Bohrovom postuláte. Takto na základe neobyčajnej myšlienky Louse de Broglieho bolo možné vysvetliť, prečo sa elektróny pri pohybe okolo jadra pohybujú len po presne vymedzených dráhach.

"Nová mechanika" ktorá tak výborne poslúžila pri vysvetlení experimentálnych výsledkov získaných koncom 19. storočia, priniesla zároveň neprekonateľné problémy pri formulovaní pohybovej rovnice. Kvantovo-mechanická pohybová rovnica musela totiž v sebe spájať vlnové a súčasne aj korpuskulárne vlastnosti mikroskopických častíc. V roku 1923 sa Erwin Schödinger pokúsil spojiť vlnové vlastnosti (popísané vlnovou rovnicou):

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} \quad (3.31)$$

kde: $u(x, t)$ je funkcia popisujúca vlnenie v jednom rozmere a čase (napríklad výchylku) a v je rýchlosť vlnenia, a pohyb korpuskulárnej častice (popísané hamiltonovou rovnicou):

$$E = \frac{p^2}{2m} + U \quad (3.32)$$

kde: E je celková energia, p je hybnosť a U je potenciálna energia, do jednej univerzálnej rovnice. Z poslednej rovnice, po úprave, dostaneme pre hybnosť:

$$p = \sqrt{2m(E - U)} \quad (3.33)$$

Za predpokladu, že platí de Broglieho hypotéza o priradení vlny pohybujúcej sa častici, použijúc vzťah (3.29), možno pre zodpovedajúcu vlnovú dĺžku λ písať:

$$\lambda = h\sqrt{2m(E - U)} \quad (3.34)$$

Po malej úprave dostaneme:

$$\frac{v^2}{\lambda^2} = \frac{2mv^2(E - U)}{h^2} \quad (3.35)$$

Vlnovú rovnicu, pôvodne priestorovo-časovú rovnicu možno, pomocou substitúcie:

$$u(x, t) = w(x) \exp(-i\omega t) \quad (3.36)$$

(kde: $\omega=2\pi f$ a nazýva sa kruhová frekvencia), rozdeliť na priestorovú a časovú zložku, (treba starostlivo urobiť deriváciu podľa času a dosadiť) takže dostaneme obyčajnú diferenciálnu rovnicu:

$$\frac{d^2 w(x)}{dx^2} + \frac{\omega^2}{v^2} w(x) = 0 \quad (3.37)$$

Ak v poslednej rovnici upravíme podiel ω^2/v^2 pomocou vzťahu $\omega=2\pi f$ a $p=h/\lambda$ dostaneme:

$$\frac{d^2 w(x)}{dx^2} + \frac{p^2}{\hbar^2} w(x) = 0 \quad (3.38)$$

Po dosadení za hybnosť z rovnice (3.33) dostaneme:

$$\frac{d^2 w(x)}{dx^2} + \frac{1}{\hbar^2} 2m(E - U) w(x) = 0 \quad (3.39)$$

Po malej úprave a zamenením $w(x)$ za $\varphi(x)$, pretože tak obyčajne označujeme amplitúdu hmotnej vlny dostaneme:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right) \varphi(x) = E \varphi(x) \quad (3.40)$$

Výraz v zátvorke nazývame Hamiltonov operátor a označujeme $\hat{H}$

. Rozšírenie rovnice na tri rozmery nerobí žiadne principiálne ťažkosti. V uvedenej rovnici nevystupuje čas, ktorý sme vylúčili použitím substitúcie (2.35). Riešením bezčasovej rovnice dostaneme iba stacionárne riešenia. Pohybovú rovnicu dostaneme po dosadení substitúcie a zamenením $u(x,t)$ za $\psi(x,t)$:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x, t) \right) \Psi(x, t) \quad (3.41)$$

Táto rovnica v sebe spája vlnovú a klasickú pohybovú rovnicu a dnes ju nazývame Schrödingerova rovnica na počesť Ervina Schrödingera. Pre zachovanie historickej objektivity treba poznamenať, že nezávisle na Schrödingerovi odviedil podobnú rovnicu Werner Heisenberg.

Kapitola 4

Poloha a hybnosť kvantovo-mechanickej častice

Keď sa Ervinovi Schödingerovi podarilo odvodiť pohybovú rovnicu, ktorá dokázala spojiť vlnové a korpuskulárne vlastnosti mikročastice, odštartovala sa tým diskusia ako súvisí makrosvet, v ktorom žijeme a pozorujeme ho, s nehmateľným a do istej miery abstraktným mikrosvetom vlnno-častíc. Bolo sa treba opýtať kde je hranica medzi mikrosvetom a makrosvetom a či je vôbec možné nahliadnuť za hranice kvantového mikrosveta. V roku 1926 sa pokúsil Werner Heisenberg (vtedy len 25 ročný fyzik) na základe poznatkov z kvantovej teórie interpretovať pozorovanie mikrosveta. V myšlienkovom experimente použil nesmierne výkonný mikroskop, ktorý je schopný pozorovať jednotlivé elektróny. Na to aby to bolo možné musí pozorovateľ, v súlade s klasickou fyzikou makrosveta, poznať polohu a hybnosť pozorovaného objektu. To sa dá urobiť tak, že pozorovateľ vyšle k skúmanému objektu "sondu", ktorá sprostredkuje informáciu o pozorovanom objekte z mikrosveta. Sonda, na to aby bola schopná požadovanú informáciu sprostredkovať, musí mať podobné rozmery ako skúmaný objekt.

V prípade elektrónu treba použiť kvantum elektromagnetického žiarenia - fotón, ktorý je "dostatočne zaostrený", aby pozorovateľ bol schopný určiť polohu. Nech je teda použitý fotón lokalizovaný v smere pohybu na úsečke dĺžky Δx . Takáto lokalizácia sa dá vytvoriť len pomocou vhodne skonštruovanej interferencie rovinných vln. To je dôvod, prečo lokalizovanej vlne hovoríme **vlnový balík**. Lokalizácia na úsečke dĺžky Δx , znamená, že amplitúda vlny (ako neskôr uvidíme ide o komplexnú vlnu) mimo úsečky je nulová. Teda interferencia musí byť taká, aby sa jednotlivé vlny mimo intervalu $(-\Delta x/2, \Delta x/2)$ navzájom zrušili. Aby to bolo možné musia sa vo vlnovom balíku vyskytovať vlny s dĺžkami λ a λ' takými, že sú v protifáze (rušia sa) pri okraji balíka a v strede balíka sú vo fáze (zosilujú sa). Ak teda na

interval $\Delta x/2$ pripadne n periód s vlnovou dĺžkou λ [A0?] a $n+1$ periód s vlnovou dĺžkou λ' čo možno zapísať nasledovne:

$$\frac{\Delta x}{2} = n\lambda \quad (4.1)$$

$$\frac{\Delta x}{2} = (n+1)\lambda' \quad (4.2)$$

Odčítaním oboch rovníc a po vynásobení 4π dostaneme:

$$\Delta x \left(\frac{2\pi}{\lambda'} - \frac{2\pi}{\lambda} \right) = 2\pi \quad (4.3)$$

alebo ak uvážime, že vlnčet (počet periód na jednotku dĺžky) $k=2\pi/\lambda$ [A0?]/posledný vzťah možno prepísať:

$$\Delta x \Delta k = 2\pi \quad (4.4)$$

kde $\Delta k = (1/\lambda') - (1/\lambda)$ a označuje rozsah intervalu frekvencií rovinných vĺn, potrebných na vytvorenie požadovaného vlnového balíka lokalizovaného na intervale Δx .

Z poslednej rovnice vidno, že so skracovaním vzdialenosti Δx na ktorej je vlnový balík lokalizovaný, narastá počet potrebných frekvencií. Pozorovateľ pri pozorovaní polohy, sa bude snažiť zlepšovať meranie polohy mikroskopického objektu tak, že bude zaoštrovať (teda lokalizovať) vysielaný vlnový balík. Tak môže v podstate dosiahnuť neobmedzenú presnosť v určení polohy. Ak sa pozorovateľ rozhodne zmerať aj rýchlosť častice, musí použiť dva vlnové balíky vyslané tesne za sebou aby priniesli informáciu o polohe častice v čase t a $t+\Delta t$. Podľa klasickej formule:

$$v = \frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t} \quad (4.5)$$

kde v je rýchlosť častice, určí rýchlosť častice. Aby presne lokalizoval polohu v potrebných dvoch bodoch, použije veľmi zaoštrované vlnové balíky. Podľa teórie Louise de Broglieho je však pohybujúca sa mikroskopická častica charakterizovaná vlnou. V procese "zrážky" vlnového balíku s časticou tieto spolu interferujú a vznikne nový "stav" mikročastice. Podľa vysvetlenia Comptonovho javu, v procese interakcie odovzdá vlnový balík časť svojej energie častici, ktorá sa v istom čase pohybuje zrýchlenie. Výraz (3.4) však predstavuje klasickú (makroskopickú) definíciu rýchlosti a uvažuje sa v ňom, že sa sledovaná častica počas časového intervalu Δt , pohybuje rovnomerne. V našom prípade, nasledujúci vlnový balík nájde časticu v stave po zrýchlení,

takže rýchlosť podľa (3.4) nemožno presne určiť. Tento jav možno potlačiť tak, že pozorovateľ bude skracovať čas medzi jednotlivými meraniami. Musí však použiť viac lokalizované vlnové balíky, aby tieto neinteragovali navzájom. Tým však zväčšuje ich energiu (na ich vytvorenie "použije" väčší počet rovinných vln) a zároveň zväčšuje aj urýchľovací efekt. Aby potlačil urýchľovací efekt, môže použiť málo lokalizovaný vlnový balík - tvorený malým počtom rovinných vln. V hraničnom prípade použije len jednu rovinnú vlnu, ktorá vytvorí úplne nelokalizovaný vlnový balík. Tak bude zvyšovať presnosť určenia rýchlosti. So zvyšovaním presnosti určenia rýchlosti častice však bude klesať presnosť určenia polohy a opačne. Zostáva už len určiť či existuje nejaká optimálna kombinácia polohy a rýchlosti, pri ktorej sa dá minimalizovať vzájomná nepresnosť merania. Tu sa musíme vrátiť k samotnej podstate tvorenia vlnového balíku. Použijeme rovnicu (4.4):

$$\Delta x \Delta k = 2\pi \quad (4.6)$$

Po dosadení z de Brogieho rovnice $\lambda = h/p$ a uvážením $\Delta k = 2\pi / \Delta \lambda$ po malej úprave dostaneme:

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \quad (4.7)$$

čo je optimálny vzťah medzi presnosťou určenia polohy a hybnosti vlnovej častice. Keďže v experimente nenastáva optimálny stav, poslednú rovnosť obyčajne uvádzame vo forme nerovnosti:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (4.8)$$

Táto nerovnosť vyjadruje slávny princíp neurčitosti formulovaný Wernerom Heisenbergom v roku 1926 a poukazuje na hranicu medzi mikro a makro svetom.

Po uverejnení princípu neurčitosti - mimochodom známom z optiky už dávnejšie - vo fyzikálnej obci sa rozpútala búrlivá diskusia. Tento princíp totiž napáda samotnú podstatu deterministického ponímania sveta. V septembri roku 1927 sa v luxusnom hoteli Métropole v Bruseli schádza vtedajší výkvet fyzikálneho sveta. Vybranú spoločnosť tvorí 28 pánov a jedna dáma. Cieľom ich stretnutia je urobiť poriadok v interpretácii výsledkov kvantovej mechaniky. Počas stretnutia sa do sporu (samozrejme vedeckého) dostali Niels Bohr, zástanca princípu neurčitosti a vlnovo-časticovej interpretácie (kodanská skupina fyzikov) a Albert Einstein, ktorý napriek tomu že, vysvetlením vonkajšieho fotoelektrického javu otvoril dvere "novej fyzike", pri interpretácii pravdepodobnostnej fyziky sa stal jej najväčším odporcom. Výsledkom týždenných diskusií bolo víťazstvo kodanskej skupiny fyzikov a

formulovanie základných postulátov kvantovej mechaniky. Ich znenie (pre jednorozmerný prípad) je nasledujúce (pre lepšie pochopenie ich uvádzame spolu s príkladom elektrónu viazaného na úsečku):

Postulát I: Fyzikálny stav častice je úplne popísaný komplexnou vlnovou funkciou $\Psi(x,t)$. Hustota rozdelenia pravdepodobnosti výskytu častice je daná ako $P(x,t) = \Psi^*(x,t) \Psi(x,t)$, (tento súčin nazývame komplexný kvadrát).

Uvažujme jednoduchý prípad, keď je elektrón viazaný na interval dĺžky L . Ako neskôr uvidíme, to zodpovedá prípadu jednorozmernej nekonečne hlbkej potenciálovej jame. Podľa zadania vyžadujeme, aby sa elektrón vyskytoval na intervale $<0,L>$. Stav elektrónu (v istom okamihu) predpíšeme vlnovou funkciou:

$$\Psi(x, t) = Ax(L - x) \quad (4.9)$$

kde: čas je parameter a vo vlnovej funkcii explicitne nevystupuje. Tvar funkcie sme zvolili do istej miery od oka a v ďalšom budeme zisťovať, aplikovaním postulátov, nakoľko je tento tvar správny.

Podľa prvého postulátu, kvadrát navrhovanej funkcie zodpovedá hustote rozdelenia pravdepodobnosti v danom okamihu. Normalizačnú konštantu A určíme z predpokladu, že elektrón sa s pravdepodobnosťou rovnej jedna vyskytuje na intervale $<0,L>$:

$$1 = \int_0^L \Psi^2(x, t) dx \quad (4.10)$$

alebo po dosadení zo vzťahu (4.9):

$$1 = \int_0^L \{Ax(L - x)\}^2 dx \quad (4.11)$$

po "vyriešení" integrálu a malej úprave dostaneme:

$$A = \sqrt{\frac{30}{L}} \quad (4.12)$$

Navrhovaná vlnová funkcia teda existuje aj keď to ešte nezaručuje, že je riešením zodpovedajúcej Schrödingerovej rovnice.

Postulát II: Vlnová funkcia $\Psi(x,t)$ ako aj jej prvá a druhá derivácia podľa súradnice musí byť spojitá a jednoznačná pre všetky hodnoty x .

Navrhnutá vlnová funkcia je spojitá včítane prvej a druhej derivácie.

Postulát III: Každá veličina, ktorú je možné fyzikálne pozorovať, je v kvantovej mechanike reprezentovaná hermitovským operátorom $\hat{A}$.

V klasickej mechanike potrebujeme na jednoznačné určenie pohybu hmotného bodu určiť polohu a hybnosť hmotného bodu. Keďže toto pravidlo platí aj v kvantovej mechanike (len veličiny majú iný tvar), musíme nájsť príslušné operátory polohy a hybnosti elektrónu viazaného na úsečke dĺžky L . V Schrödingerovej rovnici (pripomíname ide o pohybovú rovnicu) vystupuje poloha v potenciálnej energii, ktorá je reálna coulombovská. Operátor polohy je teda totožný s polohou:

$$\hat{x} = x \quad (4.13)$$

Hybnosť vystupuje v kinetickej energii:

$$E_k = \frac{p^2}{2m_e} \quad (4.14)$$

v kvantovomechanickej interpretácii vlnno-častice je kinetická energia daná:

$$E_k = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (4.15)$$

Porovnaním posledných dvoch rovníc pre operátor hybnosti dostaneme:

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad (4.16)$$

Postulát IV: Stredná, alebo očakávaná hodnota $\langle A \rangle$ ľubovolnej pozorovateľnej veličiny A , ktorá je reprezentovaná operátorom $\hat{A}$, je daná vzťahom:

$$\langle \hat{A} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \hat{A} \Psi(x, t) dx \quad (4.17)$$

Strednú hodnotu (očakávanú hodnotu) polohy vypočítame teda nasledovne:

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_0^L \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx \quad (4.18)$$

po dosadení za $\Psi(x, t)$ (čas vystupuje opäť, ako parameter):

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_0^L x \frac{30}{L^5} x^2 (L - x)^2 dx \quad (4.19)$$

Po vyriešení posledného integrálu pre očakávanú hodnotu polohy elektrónu dostaneme:

$$\langle \hat{x} \rangle = \frac{L}{2} \quad (4.20)$$

To znamená, že očakávaná hodnota polohy elektrónu, teda to, čo budeme merať v experimente, je práve v strede úsečky, na ktorej je lokalizovaný. V tomto prípade je tam aj najväčšia amplitúda vlnovej funkcie.

Strednú (očakávanú) hodnotu hybnosti vypočítame podobne:

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_0^L \Psi^*(x, t) \frac{\hbar}{i} \Psi(x, t) dx \quad (4.21)$$

po dosadení za $\Psi(x, t)$:

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_0^L x \frac{30}{L^5} x(L-x) \frac{\hbar}{i} \{(L-x) - x\} dx \quad (4.22)$$

Po vypočítaní posledného integrálu pre strednú hodnotu hybnosti dostaneme:

$$\langle \hat{p} \rangle = 0 \quad (4.23)$$

Tento výsledok sme očakávali, pretože viazaný elektrón sa makroskopicky nepohybuje. Na určenie nepresnosti merania potrebujeme určiť strednú kvadratickú odchýlku merania (normálne štatistické spracovanie merania) polohy a hybnosti. Teda po dosadení do základných vzťahov:

$$\langle \Delta x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad (4.24)$$

kde:

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^L \Psi^* \hat{x}^2 \Psi(x, t) dx \quad (4.25)$$

Po dosadení príslušných vzťahov a vyriešení integrálu dostaneme:

$$\langle \Delta x \rangle^2 = \frac{L^2}{28} \quad (4.26)$$

Podobne pre strednú kvadratickú odchýlku merania hybnosti:

$$\langle \Delta p \rangle^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2 \quad (4.27)$$

kde:

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \int_0^L \Psi^*(x, t) \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \Psi(x, t) dx \quad (4.28)$$

Znovu po dosadení a vyriešení integrálu dostaneme:

$$\langle \Delta p \rangle^2 = \frac{10\hbar^2}{L^2} \quad (4.29)$$

Súčin strednej kvadratickej odchýlky merania polohy a hybnosti nám dá celkovú neistotu merania polohy a hybnosti (pripomíname, že tieto dve veličiny potrebujeme podľa klasickej mechaniky na určenie stavu pohybujúceho sa hmotného telesa) dostaneme:

$$\langle \Delta x \rangle^2 \langle \Delta p \rangle^2 = \frac{10\hbar^2}{28} > \frac{\hbar^2}{4} \quad (4.30)$$

Posledná nerovnosť spĺňa vzťah neurčitosti. To má nesmierny význam, pretože aplikovaním prvých štyroch postulátov možno získať vzťah neurčitosti.

Postulát V: Prípustným výsledkom merania veličiny A reprezentovanej operátorom $\hat{A}$ je ktorákoľvek z vlastných hodnôt a_i operátora $\hat{A}$.

To že elektrón je viazaný na úsečku je čiste formálna úvaha. V reálnom experimente to znamená elektrón "umiestnený" medzi dvomi paralelnými kovovými doskami, ktoré sú nabitý na vysoký záporný potenciál. Medzi doskami je potenciál nulový. Platí teda:

$$V(x) = 0 \quad 0 \leq x \leq L \quad (4.31)$$

$$V(x) = \infty \quad x < 0, x > L \quad (4.32)$$

Pre tento potenciál budeme riešiť bezčasovú Schrödingerovu rovnicu :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \varphi(x) = E\varphi(x) \quad (4.33)$$

Riešenie hľadáme intervale $x=(0,L)$, pretože mimo intervalu $(0,L)$ je riešenie nulové. Ak je $V(x)=0$ možno poslednú rovnicu prepísať do tvaru obvyčajnej diferenciálnej rovnice:

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + k^2 \varphi(x) = 0 \quad (4.34)$$

kde:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (4.35)$$

Jej riešenie je ľahké - spomeňte si na riešenie úlohy o harmonickom oscilátore - dostaneme ho vo forme súčtu harmonických funkcií:

$$\varphi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (4.36)$$

kde A a B sú konštanty, ktoré treba určiť z okrajových podmienok, v našom prípade:

$$\varphi(0) \equiv \varphi(L) = 0 \quad (4.37)$$

Z okrajovej podmienky v bode $x=0$ vyplynie, že $B=0$. Z druhej okrajovej podmienky (v bode $x=L$) dostaneme:

$$k \equiv k_n = \frac{n\pi}{L} \quad (4.38)$$

kde n je celé číslo.

Konštantu A určíme z normovacej podmienky:

$$1 = \int_0^L |A \sin(k_n x)|^2 dx \quad (4.39)$$

Po vyriešení posledného integrálu dostaneme pre ľubovoľné (prípustné) k_n :

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad (4.40)$$

Výsledný tvar "dovolenej" vlnovej funkcie $\varphi(x)$ dostaneme po dosadení "normovacej" konštanty A a B ($B=0$ len v našom prípade, vo všeobecnosti to tak nemusí byť):

$$\varphi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (4.41)$$

kvadrát tejto funkcie (vo všeobecnosti komplexný súčin $\varphi^*(x) \varphi(x)$) určuje hustotu rozdelenia pravdepodobnosti výskytu častice v bode x . Pravdepodobnosť, že časticu nájdeme v intervale polôh $\langle x, x+\Delta x \rangle$ [A0?]^{n-tej} energetickej hladine je daná:

$$P_n(x) = \int_x^{x+\Delta x} \varphi_n^*(x) \varphi_n(x) dx \quad (4.42)$$

Prípustné hodnoty energie (vlastné čísla operátora) sústavy elektrónu viazaného na úsečku dostaneme, ak aplikujeme (zamená to, že urobíme operácie uvedené v operátore) operátor celkovej energie (v kvantovomechanickom vyjadrení je energia operátor):

$$\hat{E} \equiv \hat{T} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 \quad (4.43)$$

na funkciu $\varphi(x)$ (pozri 4.36 a 4.40):

$$\hat{E}\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x) \quad (4.44)$$

Po starostlivom vykonaní dvojnásobnej derivácie (ukrytej v operátore hybnosti) pre dovolené energie sústavy dostaneme:

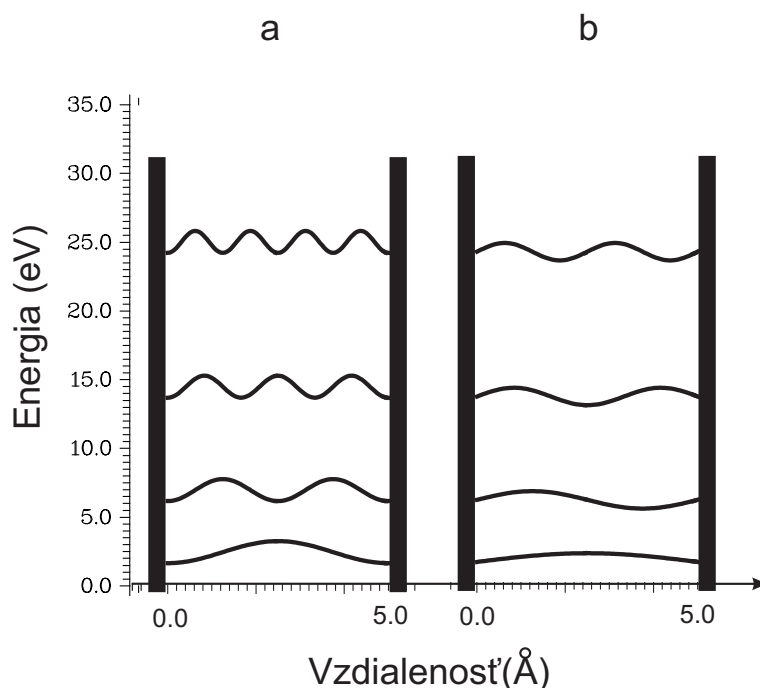
$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 \quad (4.45)$$

alebo po dosadení za k_n (4.38):

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL} n^2 \quad (4.46)$$

Podľa posledného výrazu, sú v sústave lokalizovaného elektrónu prípustné len určité energie. "Vzdialenosť" medzi jednotlivými energetickými hladinami je nepriamo úmerná dĺžke intervalu na ktorom je elektrón lokalizovaný. Ak rozšírime interval do nekonečna dostaneme spojité spektrum energie, čo je charakteristické pre voľnú časticu. Energetický rozdiel medzi dvomi hladinami rastie kvadraticky s rastúcim n . Výsledok sa líši od závislosti odvodennej Balmerom pre energetickú vzdialenosť dvoch hladín (orbitálov) v atóme vodíku ($\Delta E \approx \frac{1}{n^2}$), pretože tam sa elektrón pohybuje v trojrozmernom coulombickom poli, čo je úplne iný problém.

Existenciu izolovaných energií (diskrétné energetické spektrum) možno pochopiť tak, že v riešení vyžadujeme nulovú hodnotu vlnovej funkcie na okrajoch intervalu, na ktorom je elektrón viazaný. Je to podobné ako keď kmitá struna, upevnená v dvoch pevných bodoch, len na určitých (dovolených) frekvenciách. Každéj frekvencii prislúcha stacionárne vlnenie také, ktoré spĺňa okrajové podmienky. Na obrázku 4.1a sú zobrazené tri prvé vlastné funkcie, ktoré môžu v stacionárnom stave existovať v nekonečne hlbokéj potenciálovej jame. Hustota rozdelenia pravdepodobnosti existencie častice je nakreslená na obrázku 4.1b. Na najnižšej energetickej hladine (prvá vlnová funkcia) je hustota rozdelenia pravdepodobnosti najväčšia v strede intervalu na ktorom je elektrón (vlna častica) viazaný. Na druhej energetickej hladine je hustota rozdelenia pravdepodobnosti v strede intervalu nulová.



Obr. 4.1: *Tvar vlnovej funkcie (a) a hustoty rozdelenia pravdepodobnosti výskytu (b) elektrónu "uzavretého" medzi nabitými doskami, ktoré predstavujú "nekonečne hlbokú potenciálovú jamu.*

"rozpadne" na množinu dovolených vlnových funkcií (4.41). Ak sa počiatkový stav približuje k niektorej z vlastných funkcií potom výsledný stav zahrňuje len malý počet funkcií. V opačnom prípade sa počiatkový stav rozpadne na veľký počet vlastných funkcií s nenulovou amplitúdou. V našom prípade sme za počiatkový stav zvolili kvadratickú funkciu, ktorá nie je vlastnou funkciou. Jej priemet (realizáciu) na najnižšiu vlastnú funkciu vypočítame:

$$P = \left| \int_0^L \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \{x(L-x)\} dx \right|^2 \quad (4.47)$$

Po vypočítaní posledného integrálu dostaneme $P=0.999$. To znamená, že 99,9 % vnúteného stavu sa realizuje na najnižšej energetickej hladine. To preto, lebo funkcia $f(x) = Ax(L-x)$ je "podobná" na intervale $<0,L>$ prvej vlastnej funkcii $\varphi_1(x)$.

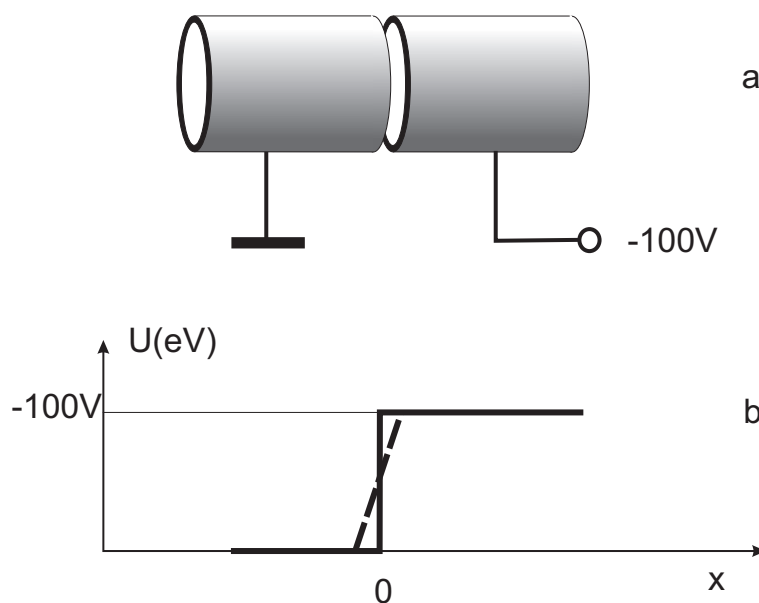
Na príklade sme videli ako pomocou postulátov prijatých v roku 1927 na stretnutí fyzikov v hoteli Métropol v Bruseli dokážeme vysvetliť intuitívne závery fyzikov v predchádzajúcich rokoch. Tu by sa dalo povedať, že fyzika

opäť raz dosiahla svoje maximum a už nie je čo skúmať, pretože všetko už bolo objavené. Vyvarujme sa však podobných unáhlených záverov, ktoré koncom 19. storočia priviedli fyzikálnu obec na pokraj vedeckej priepasti. Ďalej uvidíme, že vyriešením jednej záhady sa vynoria nové a nové, ktoré je potrebné vyriešiť.

Kapitola 5

Interakcia vlnno-častice s potenciálom

Predstavme si jednoduché jednorozmerné zariadenie pozostávajúce z dvoch kovových prstencov, z ktorých jeden je uzemnený a druhý má oproti prvému záporný potenciál $U=-100\text{V}$ tak ako je nakreslené na obrázku 5.1.a. Z ľavej strany nech do experimentálneho zariadenia prichádza záporne nabitá mikroskopická častica (napríklad elektrón so záporným nábojom) s kinetickou energiou $T=180\text{eV}$.



Obr. 5.1: Zariadenie na "vytvorenie" potenciálu schodovitého tvaru (a).
Pribeh potenciálu vytvoreného v zariadení (b).

Pred príchodom do prvého prstenca sme jeho vlastnosti "upravili" tak, že poznáme presne jeho hybnosť. Podľa princípu neurčitosti v takomto prípade bude jeho poloha "úplne" rozmazaná a je realizovaný len jednou jedinou vlnou s frekvenciou f . Keďže druhý prstenec má záporný potenciál vzhľadom na prvý, nemôže sa ho tento priamo dotýkať a musia byť separované aj keď malou ale konečnou medzerou, ktorú označíme dx . Na obrázku 5.1.b je priebeh potenciálu na skutočnej štrbine znázornený čiarkovanou čiarou. Pri pohybe elektrónu pozdĺž štrbiny pôsobí na tento sila:

$$F = -\frac{dU(x)}{dx} \quad (5.1)$$

Pôsobením tejto sily je elektrón je spomalovaný podľa druhého Newtonovho zákona. Treba poznamenať, že pravouhlý potenciál sa nedá vyrobiť ani použiť, pretože by "vyvolával" nekonečne veľké zrýchlenie. Napriek tomu pri našom rozprávaní použijeme práve takéto priblíženie, pretože kvalitatívne výsledky sú správne. Na obrázku 6b je idealizovaný potenciál znázornený plnou čiarou. Na "riešenie" úlohy o pohybe je potrebné riešiť pohybovú rovnicu. Pre mikroskopickú časticu sa pohybová rovnica nazýva Schrödingerova rovnica (keďže opakovanie je matkou múdrosti napíšme ju znovu):

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \varphi(x) = E\varphi(x) \quad (5.2)$$

kde $\varphi(x)$ je tvar vlny, ktorý popisuje správanie sa delokalizovaného elektrónu v potenciáli $V(x)$. Ten je v prvom prstenci nulový (taký prípad sme už riešili), a v druhom nadobúda nenulovú hodnotu - v našom prípade zápornú vzhľadom na prvý prstenec. Ak umiestnime štrbinu do počiatku súradnej sústavy (vždy to ide urobiť), potom pre potenciál platí:

$$V(x) = 0eV \quad x \leq 0 \quad (5.3)$$

$$V(x) = -100eV \quad x > 0 \quad (5.4)$$

Riešenie rovnice (5.2) pre $x < 0$ ktoré označíme ako $\varphi_I(x)$ sa bude skladať z dvoch častí: vlny prichádzajúcej z ľava $\varphi_{IL}(x)$ a z vlny odrazenej na potenciáli, prichádzajúcej z prava $\varphi_{IP}(x)$. Podľa riešenia úlohy s nekonečne hlbokým potenciálom už vieme, že každá z vln má dve zložky:

$$\varphi(x) = A \sin(x) + B \cos(x) \quad (5.5)$$

kde koeficienty A a B určíme z okrajových podmienok, pričom nie vždy máme také šťastie, ako pri úlohe s nekonečne hlbokým potenciálom, kde

sa jeden koeficient rovná nule. Aby sme nemuseli počas riešenia pamätať na množstvo koeficientov, prácu si trochu zjednodušíme (len formálne). Ak zavedieme komplexné čísla:

$$\alpha = a_r + ia_i \quad (5.6)$$

a komplexný exponent:

$$e^{ikx} \equiv \exp(ikx) = \cos(kx) + i \sin kx \quad (5.7)$$

kde k je ľubovoľné reálne číslo, potom celkové riešenie $\varphi_1(x)$ (vľavo od štrbiny) možno elegantne napísať v tvare:

$$\varphi_1 = ae^{ikx} + be^{-ikx} \quad (5.8)$$

kde a a b sú komplexné čísla a:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (5.9)$$

Posledný vzťah možno overiť dosadením do rovnice (4.2). Výsledná vlna (pochopiteľne komplexná funkcia $\varphi_1(x)$) bude výsledkom interferencie prichádzajúcej a odrazenej vlny. Na druhej strane štrbiny bude situácia podobná, až na to, že potenciál je nenulový a nevystupuje tam žiadna odrazená vlna - nemá sa na čom odraziť. Teda celkové riešenie vpravo od štrbiny je:

$$\varphi_2 = ce^{iqx} \quad (5.10)$$

kde c je komplexné číslo a:

$$q = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \quad (5.11)$$

kde V_0 je hodnota potenciálu oproti uzemnenému prstencu. Koeficienty a, b a c vypočítame na základe požiadavky druhého postulátu, podľa ktorého musí byť vlnová funkcia spofitá včítane svojich derivácií v celej oblasti. Teda aj na rozhraní skokovej zmeny potenciálu v bode $x=0$.

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0) \quad (5.12)$$

$$\frac{d}{dx}\varphi_1(x) \big|_0 = \frac{d}{dx}\varphi_2(x) \big|_0 \quad (5.13)$$

kolmá čiara za funkciou znamená, že po derivácii podľa x dosadíme za premennú nulu. Po starostlivom zderivovaní a dosadení dostaneme dve rovnice:

$$a + b = c \quad (5.14)$$

$$k(a - b) = qc \quad (5.15)$$

kde vystupujú tri neznáme koeficienty. Z tejto sústavy možno vypočítať dva koeficienty, ktoré budú vystupovať ako funkcie tretieho. Obyčajne vyjadríme koeficienty b a c . Koeficient a zostáva ako parameter, pretože označuje amplitúdu prichádzajúcej vlny.

V tejto časti sa čitateľ isto opýta, čo z toho čo sme v predchádzajúcej časti vyjadrili je matematická fikcia a čo možno zmerať v experimente. Komplexnú funkciu určite nie, pretože tú sme zaviedli len na "zníženie" počtu koeficientov. V reálnom experimente možno meracím prístrojom "vidieť" intenzitu $I(x)$, ktorá (v istom priblížení) zodpovedá hustote rozdelenia pravdepodobnosti:

$$P(x) = \varphi^*(x)\varphi(x) \quad (5.16)$$

ktorá je už reálnou funkciou súradnice x . Ak nebude stáť v ceste častice žiadna prekážka vo forme potenciálového skoku, bude hustota rozdelenia pravdepodobnosti všade konštantá. Takýto prípad sme zobrazili na obrázku 5.2. Treba poznamenať, že v prípade voľnej častice nie je možné normovanie podľa predpisu:

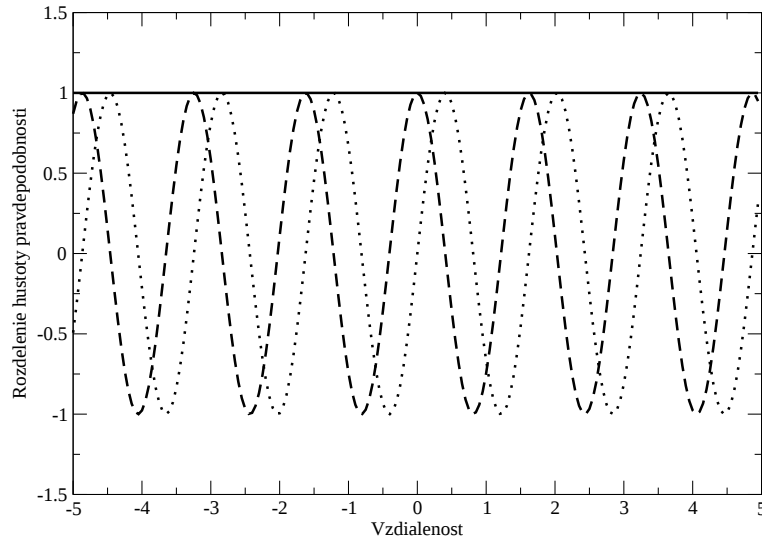
$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} P(\xi) d\xi \quad (5.17)$$

pretože tento integrál pre voľnú časticu diverguje. V obrázku 5.2 je normovanie na jednotku urobené umelo. Vidíme, že fáza reálnej a imaginárnej zložky je tak posunutá, aby ich komplexný kvadrát (5.16) dával konštantu. Ak do cesty pôvodne vľnej častice postavíme prekážku vo forme potenciálového rozdielu (pozri obrázok 5.1), častica čiastočne vchádza do oblasti za potenciálovým skokom a úlne sa odráža späť, ak je potenciálový rozdiel U väčší, ako energia častice E . Pozri obrázok 5.3. Zvlnenie na ľavej strane vzniká, ako interferencia medzi prichádzajúcou a odchádzajúcou vlnou.

V prípade nižšieho potenciálového rozdielu, ako je energia častice, táto prechádza za bariéru čiastočne zabrzdená. To sa prejaví zmenou vlnovej dĺžky zložiek rozdelenia hustoty pravdepodobnosti, tak ako je to znázornené na obrázku 5.4.

V reálnom experimente sa obvykle "meria" koeficient odrazu na potenciálovom skoku. Je to reálne číslo R (zo slova reflexia) definované ako podiel kvadrátov (komplexných) amplitúd odrazenej vlny b a dopadajúcej vlny a :

$$R = \frac{|b|^2}{|a|^2} \quad (5.18)$$



Obr. 5.2: Tvar reálnej (prerušovaná čiara) a imaginárnej (bodkovaná čiara) zložky vlnovej funkcie, ktorá charakterizuje (v našej fikcii komplexných vln) stav voľného elektrónu pred bariérou a po prechode bariéry. Pre porovnanie je v obrázku vynesenej aj priebeh rozdelenia hustoty pravdepodobnosti (plná čiara).

Podobne je definovaný koeficient prechodu T (zo slova transmisia) ako podiel kvadrátov amplitúd prejdenej vlny c a dopadajúcej vlny a :

$$T = \frac{|c|^2}{|a|^2} \quad (5.19)$$

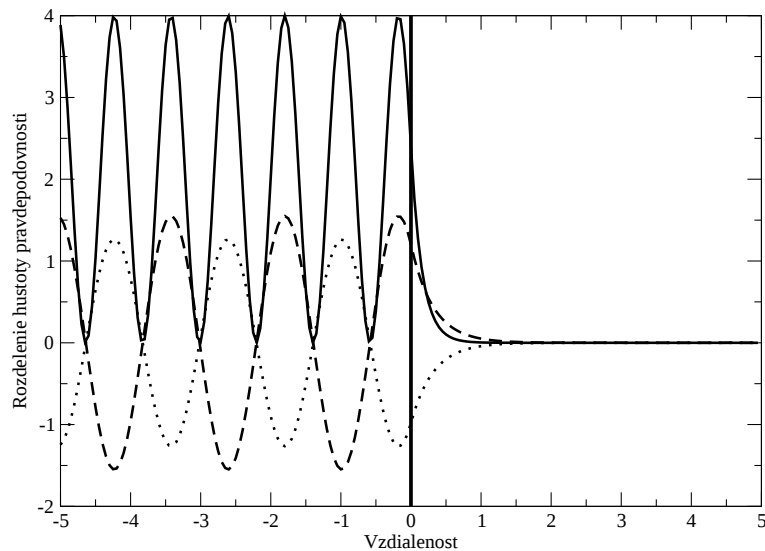
Samozrejme medzi R a T platí vzťah:

$$1 = R + T \quad (5.20)$$

Po dosadení "experimentálnych" hodnôt kinetickej energie prichádzajúceho elektrónu ($E=180\text{eV}$) a výšky bariéry ($U=100\text{eV}$) možno jednotlivé koeficienty R a T ľahko vypočítať:¹

$$R = \frac{|k - q|^2}{|k + q|^2} \equiv \frac{(\sqrt{E} - \sqrt{E - U})^2}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - U})^2} = (0.2)^2 \quad (5.21)$$

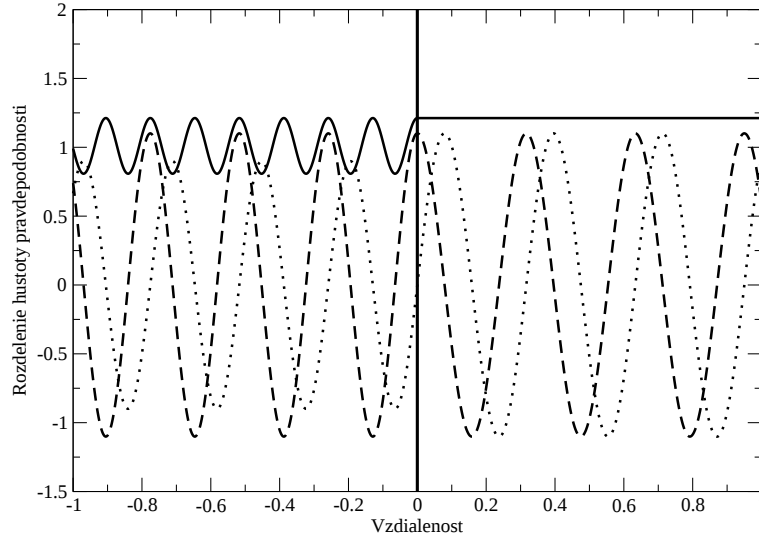
¹ Do vzťahu (5.21) treba dosadiť za potenciál U hodnotu $+100\text{V}$, pretože elektrón má záporný náboj.



Obr. 5.3: Funkcia rozdelenia hustoty pravdepodobnosti pred barérou a za barérou (plná čiara), ak jej výška je väčšia, ako energia E dopadajúcej rovinnéj vlny. Zvlnenie funkcie $P(x)$ v ľavej časti experimentálneho zariadenia vzniká ako dôsledok interferencie prichádzajúcej a odchádzajúcej vlny. V brzdnom potenciáli hustota rozdelenia pravdepodobnosti rýchlo klesá k nule. Čiarkovaná čiara znázorňuje reálnu zložku a bodkovaná imaginárnu zložku. Plná zvislá čiara predstavuje hranicu potenciálového skoku.

Pri zadanom experimentálnom usporiadaní sa "odrazí" zhruba 4% dopadnutých elektrónov. Zákonite vzniká otázka, ako je to s jednotlivým elektrónom. Odrazí sa len jeho jedna časť, alebo výsledok treba "chápať" v štatistickom zmysle? Nuž toto je typický príklad hranice medzi mikrosvetom, v ktorom sme danú úlohu o elektróne riešili, a makrosvetom v ktorom môžeme experiment realizovať. Je jasné že, experimentálny zmysel majú len reálne veličiny, komplexné veličiny sme "zaviedli" len na zníženie počtu premenných. Ich interpretácia však musí byť "makroskopická", pretože len taká vystupuje v experimente a ako taká môže byť interpretovaná našimi zmyslami. Nemá asi zmysel uvažovať čo sa stane ak v experimentálnom zariadení sa pohybuje len jeden elektrón s presne zadanou hybnosťou - to je opäť naša fikcia ktorú sme prijali na uľahčenie riešenia. Vždy tam bude mnoho elektrónov s "nepresne" zadanými hybnosťami a výsledok akéhokoľvek merania treba chápať v štatistickom zmysle.

V prípade ak použijeme urýchľujúci potenciál, koeficient reflexie R bude:



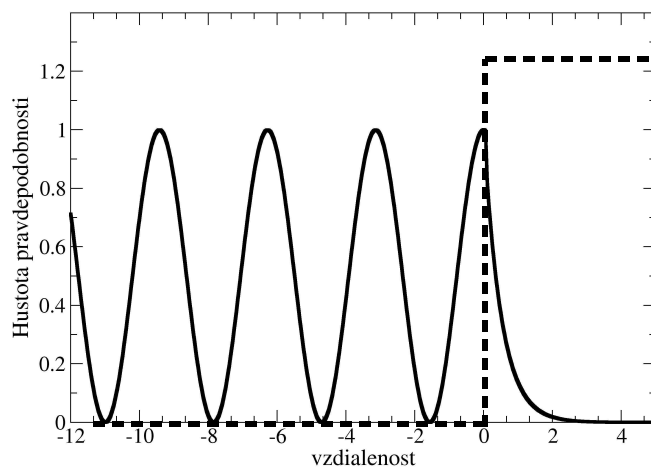
Obr. 5.4: Funkcia rozdelenia hustoty pravdepodobnosti pred barérou a za barérou (plná čiara), ak jej výška je menšia, ako energia E dopadajúcej rovinnnej vlny. Zvlnenie funkcie $P(x)$ v ľavej časti experimentálneho zariadenia vzniká ako dôsledok interferencie prichádzajúcej a odchádzajúcej vlny. Rovinná vlna prechádza do oblasti potenciálu so zmenšenou energiou. To sa prejaví, ako predĺženie vlnovej dĺžky rovinnnej vlny. Čiarkovaná čiara znázorňuje reálnu zložku a bodkovaná imaginárnu zložku. Plná zvislá čiara predstavuje hranicu potenciálového skoku.

$$R = \frac{|k - q|^2}{|k + q|^2} \equiv \frac{(\sqrt{E} - \sqrt{E + U})^2}{(\sqrt{E} + \sqrt{E + U})^2} = (0.11)^2 \quad (5.22)$$

Napriek tomu že, elektrón je na bariére urýchlenný, odrazí sa asi 1% dopadnutých elektrónov. Zaujímavé je sa pozrieť na výsledný tvar vlnovej funkcie z matematického pohľadu, pretože ten nám môže ozrejmiť formalizmus, ktorý pri riešení používame. Tvar vlnovej funkcie $\varphi_2(x)$ elektrónu po prechode potenciálovou bariérou je daná riešením Schrödingerovej rovnice pre nenulový potenciál (rovnica 5.10). Frekvencia tu vystupuje vo forme koeficientu q (rovnica 5.11), kde ako premenná vystupuje rozdiel energie E prichádzajúceho elektrónu a potenciálnej energie V_0 . V prípade ak je $E > V_0$ ich rozdiel je kladný a vplyv odpudivého potenciálu sa prejaví zmenšením frekvencie vlnovej funkcie. Podľa Einsteinovej teórie vonkajšieho fotoelektrického javu energia fotónu súvisí s jeho frekvenciou (vzťah 3.25). Pri pre-

chode elektrónu cez odpudivý potenciál sa podľa klasickej fyziky zmenší kinetická energia a podľa vlnovej fyziky zmenší frekvencia vlnovej funkcie, ktorá súvisí s energiou. Dostali sme pekný príklad duality korpuskulárnej a vlnovej vlastnosti mikroskopického objektu. Samozrejme podobnú úvahu možno urobiť aj pre makroskopický objekt - napríklad prelet nabitej sklenenej guľičky hmotnosti $1 \times 10^{-3} \text{ kg}$ cez odpudivé elektrické pole - nereálnosť vypočítaných vlnových dĺžok nás rýchlo presvedčí o nemožnosti odmerať kvantovo-mechanické výsledky podobného pokusu.

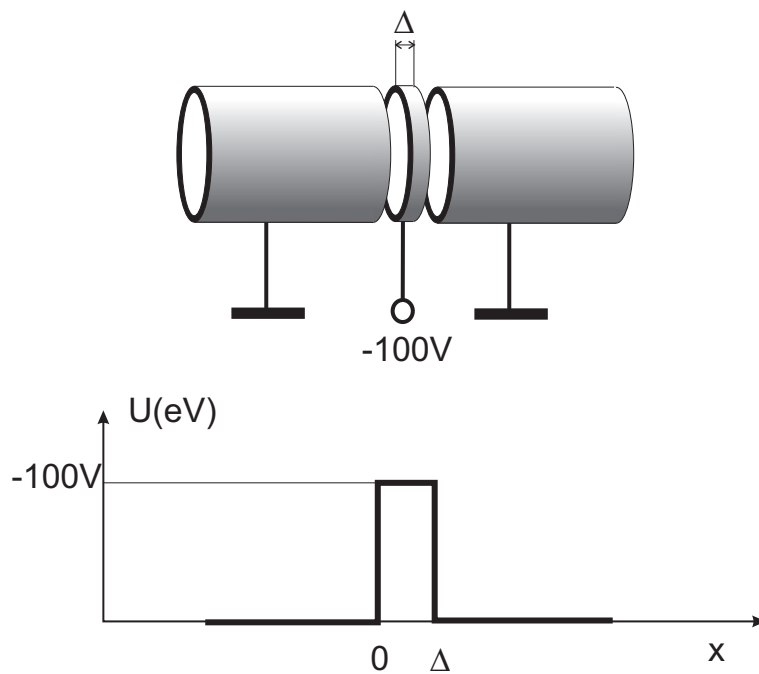
Možno sa opýtať, čo sa stane ak "výška" brzdneho potenciálu prevyšuje energiu prichádzajúceho elektrónu. Potom rozdiel $E - V_0$, vystupujúci v rovnici 5.11 pod odmocninou, je záporný. Treba si pripomenúť, že v takomto prípade je výsledok odmocňovania imaginárne číslo. V exponente funkcie $\varphi_2(x)$ (rovnica 4.8) však už jedno existuje. Ich súčin dá reálne číslo a z komplexnej periodickej funkcie sa stáva obyčajná klesajúca exponenciálna funkcia. Na obrázku 9 je zobrazený priebeh pravdepodobnosti výskytu elektrónu pozdĺž x-ovej osi pre tento prípad. Exponenciálny pokles hustoty rozde-



Obr. 5.5: *Priebeh hustoty rozdelenia pravdepodobnosti výskytu elektrónu pozdĺž x-ovej osi v experimentálnom zariadení. V oblasti odpudivého potenciálu sa hustota rozdelenia pravdepodobnosti exponenciálne znižuje.*

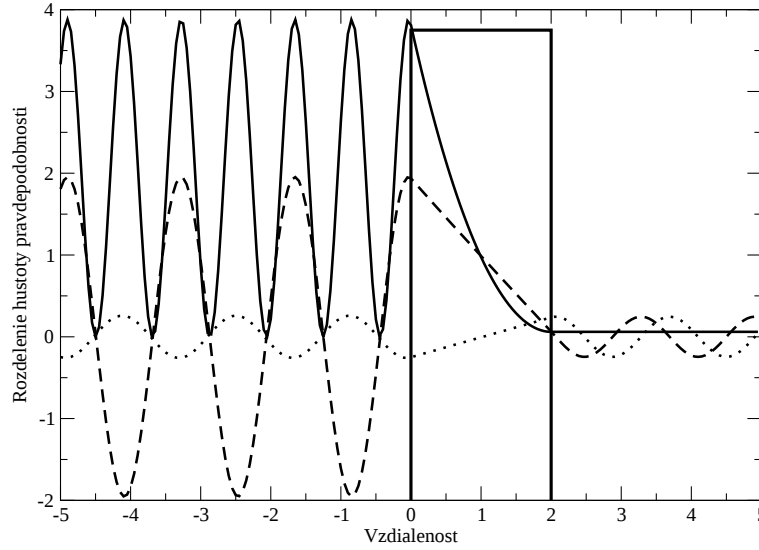
lenia pravdepodobnosti v oblasti "brzdneho" potenciálu (obrázok 5.5) nás môže priviesť na myšlienku, spraviť oblasť v ktorej je elektrón brzdený na krátkej vzdialenosti, tak aby po opustení tejto oblasti bola hustota rozdelenia

pravdepodobnosti nenulová. Návrh experimentálneho zariadenia a priebeh potenciálu je na obrázku 5.6.



Obr. 5.6: Schematický návrh experimentálneho zariadenia s tenkou oblasťou brzdného potenciálu (a) idealizovaný priebeh potenciálu ako funkcie x -ovej súradnice (b).

Tvar funkcie hustoty rozdelenia pravdepodobnosti výskytu elektrónu v experimentálnom zariadení, ktoré vytvára potenciálový skok vyšší, ako je energia prichádzajúcej vlny, je na obrázku 5.7. Oscilácie funkcie $P(x)$ v ľavej časti vznikajú ako dôsledok už spomínanej interferencie medzi prichádzajúcou a odrazenou vlnou. V intervale $<0, \Delta x>$ pozorujeme exponenciálny pokles. Po prechode bariérou je funkcia rozdelenia hustoty rozdelenia pravdepodobnosti konštantná. Pre dostatočne úzku bariéru má funkcia $P(x)$ nenulovú hodnotu, čo znamená že elektrón prešiel cez bariéru (v štatistickom zmysle) aj keď podľa klasickej mechaniky by sa mal úplne odraziť. Koeficient odrazu R a prechodu T dostaneme rovnako ako v predchádzajúcom prípade z riešenia Schrödingerovej rovnice doplnenej o príslušné okrajové podmienky. Najskôr rozdelíme použité experimentálne zariadenie na tri oblasti - na ľavo od bariéry, oblasť bariéry (tenký prstenec v strede) a na pravo od bariéry. V prvých dvoch oblastiach interferujú prichádzajúce a odchádzajúce vlny a



Obr. 5.7: Tvar reálnej (prerušovaná čiara) a imaginárnej (bodkovaná čiara) zložky vlnovej funkcie, ktorá charakterizuje (v našej fikcii komplexných vln) stav elektrónu pred bariérou a po prechode bariéry, ktorej výška je vyššia, ako je energia prichádzajúcej častice. Elektrón je intenzívne v bariére brzdený a jeho hybnosť klesá. Rozdelenie hustoty pravdepodobnosti (plná čiara) exponenciálne klesá.

v poslednej oblasti existuje len odchádzajúca vlna, ktorá sa nemá od čoho odraziť. Podobne ako v predchádzajúcom experimente pre jednotlivé oblasti navrhujeme riešenia nasledovne:

$$\varphi_1(x) = e^{ikx} + ae^{-ikx} \quad x < 0 \quad (5.23)$$

$$\varphi_2(x) = be^{iqx} + ce^{-iqx} \quad 0 \leq x \leq \Delta \quad (5.24)$$

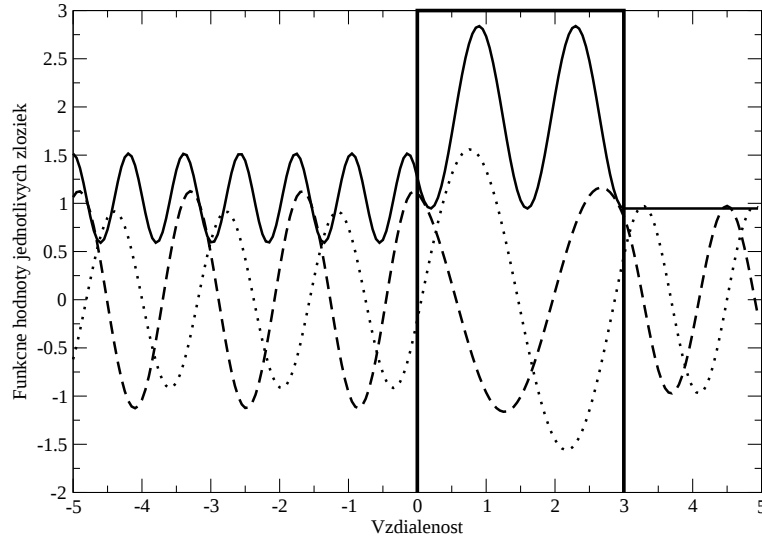
$$\varphi_3(x) = de^{ikx} \quad x > \Delta \quad (5.25)$$

kde:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad q^2 = \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2} \quad (5.26)$$

Amplitúdu prichádzajúcej vlny $\varphi_1(x)$ sme položili rovnú jednej. V predchádzajúcom riešení sme videli že ostatné amplitúdy sú funkciou amplitúdy prichádzajúcej vlny. Tento "trik" nám trochu zjednoduší riešenie. Z podmienky spojitosti riešenia na hraniciach $x=0$ a $x=\Delta$ dostaneme dve rovnice:

$$1 + a = b + c \quad be^{iq\Delta} + ce^{-iq\Delta} = de^{ik\Delta} \quad (5.27)$$



Obr. 5.8: Tvar reálnej (prerušovaná čiara) a imaginárnej (bodkovaná čiara) zložky vlnovej funkcie, ktorá charakterizuje (v našej fikcii komplexných vln) stav elektrónu pred bariérou a po prechode bariéry, ktorej výška je nižšia, ako je energia prichádzajúcej častice. Po spomalení elektrónu klesne jeho hybnosť a predĺži sa vlnová dĺžka. Pre porovnanie je v obrázku vynesenný aj priebeh rozdelenia hustoty pravdepodobnosti (plná čiara). Interferencia vzniká aj vo vnútri bariéry, ako dôsledok odrazu na zadnej strane bariéry.

a z podmienky spojitosti derivácií ďalšie dve rovnice:

$$k(1 - a) = q(b - c) \quad q (be^{iq\Delta} - ce^{-iq\Delta}) = k de^{ik\Delta} \quad (5.28)$$

Po troške námahy pre jednotlivé koeficienty dostaneme (odporúčame čitateľovi vzťahy prekontrolovať):

$$a = \frac{2i \left[\left(\frac{q}{k} \right)^2 - 1 \right] \sin(q\Delta)}{\left(\frac{q}{k} + 1 \right)^2 e^{-iq\Delta} - \left(\frac{q}{k} - 1 \right)^2 e^{iq\Delta}} \quad (5.29)$$

$$b = \frac{2 \left(\frac{q}{k} + 1 \right)}{\left(\frac{q}{k} + 1 \right)^2 - \left(\frac{q}{k} - 1 \right)^2 e^{i2q\Delta}} \quad (5.30)$$

$$c = \frac{2 \left(\frac{q}{k} - 1 \right)}{\left(\frac{q}{k} + 1 \right)^2 e^{-i2q\Delta} - \left(\frac{q}{k} - 1 \right)^2} \quad (5.31)$$

$$d = \frac{4 \left(\frac{q}{k} \right) e^{-ik\Delta}}{\left(\frac{q}{k} + 1 \right)^2 e^{-iq\Delta} - \left(\frac{q}{k} - 1 \right)^2 e^{iq\Delta}} \quad (5.32)$$

Pri počítaní s amplitúdami treba mať na pamäti že ide o komplexné čísla. Po dosadení do vlnových funkcií (5.23 - 5.25), možno ľahko vypočítať potrebné priebehy funkcií - typická úloha pre počítač. Isto teraz ľahko vyjadríme koeficienty R a T podľa definície (5.18) a (5.19) - treba mať na pamäti, že sme použili iné označenie amplitúd:

$$R \equiv \frac{|a|^2}{|1|^2} = \frac{(q^2 - k^2)^2 \sin^2(q\Delta)}{4k^2q^2 + (q^2 - k^2)^2 \sin^2(q\Delta)} \quad (5.33)$$

$$T \equiv \frac{|d|^2}{|1|^2} = \frac{4k^2q^2}{4k^2q^2 + (q^2 - k^2)^2 \sin^2(q\Delta)} \quad (5.34)$$

Zo vzťahu 5.33 vidno, že v špeciálnom prípade:

$$q\Delta = \frac{2m(E + U)}{\hbar}\Delta \equiv n\pi \quad (5.35)$$

kde $n=1,2,3,\dots$ dostaneme $R=0$ čo zodpovedá úplne priezračnej bariére. Teda pre isté kombinácie šírky a výšky bariéry sa táto stáva pre prichádzajúci elektrón bezodrazová. Pre iné šírky a výšky bariéry sa elektrón "čiastočne" dostáva na druhú stranu, aj keď by sa mal podľa klasickej mechaniky odraziť. Tento jav sa nazýva tunelovanie.

Kapitola 6

Pohybujúci sa vlnový balík

Naším cieľom je skonštruovať také riešenie Schrödingerovej rovnice, ktoré bude v sebe zahrňovať časovú zložku pohybujúceho sa vlnového balíku. Najskôr však si musíme skonštruovať predpis pre lokalizovanú vlnu-časticu. S pojmom lokalizácie sme sa už stretli pri vysvetľovaní princípu neurčitosti (vzťahy 4.1 - 4.4). Podľa úvah tam uvedených, potrebujeme takú sústavu rovinných vln (harmonické vlny šíriace sa celým priestorom) aby sa ďaleko od lokalizovanej vlnu-častice interferenciou rušili a v mieste lokalizácie naopak konštruktívnou interferenciou "vytvárali" nenulovú hodnotu. Na prvý pohľad je to nespĺniteľná úloha, ale ako za chvíľu uvidíme dá sa to urobiť. Jednu (delokalizovanú) rovinnú vlnu pre presne určenú hybnosť napíšme:

$$\varphi_p(x) = a_p \exp\left(\frac{i}{\hbar} p x\right) \quad (6.1)$$

index p pri označení vlnovej funkcie a komplexnej amplitúdy značí v oboch prípadoch "závislosť" od hybnosti. V exponente vystupuje "len" x -ová zložka hybnosti p_x . Pomocou takto definovaných rovinných vln zostrojíme lokalizovaný vlnový balík požadovaného tvaru:

$$\varphi(x) = \sum_{p=0}^{\infty} a_p \exp\left(\frac{i}{\hbar} p x\right) \quad (6.2)$$

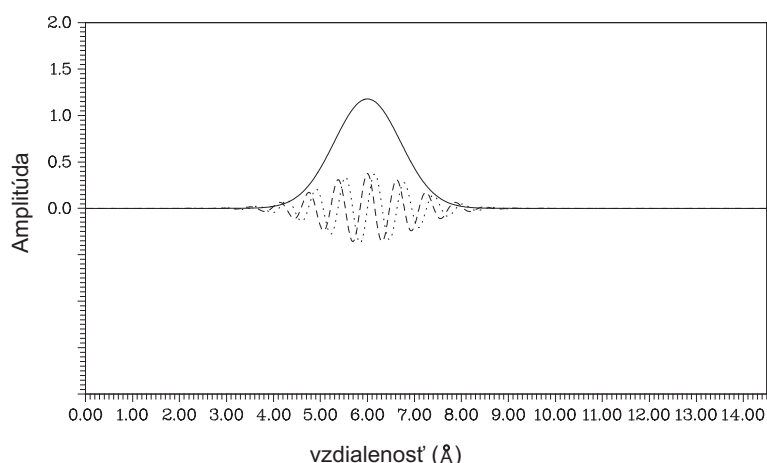
predpokladáme, že hybnosť nadobúda diskkrétne hodnoty až do nekonečna. V praktickom počítaní pochopiteľne rad odrežeme pri nejakom vhodnom p . Koeficienty a_p vypočítame podľa zadaného tvaru vlnového balíku $f(x)$:

$$a_p = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \varphi_p(x) dx \quad (6.3)$$

Hustotu rozdelenia pravdepodobnosti $P(x)$ vypačtame podľa vzťahu (5.16):

$$P(x) = \varphi^*(x)\varphi(x) \quad (6.4)$$

Na obrázku 6.1 je zobrazený priebeh rozdelenia hustoty pravdepodobnosti $P(x)$ vypočítanej použitím vzťahov (6.1) až (6.4). Prerušované čiary označujú priebehy reálnej a imaginárnej zložky vlnového balíku.



Obr. 6.1: Rozdelenie hustoty pravdepodobnosti pre vlnový balík vypočítanej podľa vzťahov (6.1) až (6.4) - plná čiara. Celkové rozdelenie $P(x)$ je dané, ako komplexný súčin z reálnej zložky - čiarkovaná čiara a imaginárnej zložky - bodkovaná čiara.

Po vykonaní komplexného násobenia je $P(x)$ reálnou a teda aj merateľnou veličinou.

Keď sa nám podarilo skonštruovať statický vlnový balík, musíme ešte vložiť do predpisu pre vlnovú funkciu časovú zložku. Na to sa musíme vrátiť späť k miestu kde sme rozdelili pôvodnú priestorovo-časovú rovnicu na priestorovú a časovú zložku. Urobili sme to pomocou substitúcie (3.36):

$$u(x, t) = w(x) \exp(-i\omega t) \quad (6.5)$$

ktorá po (formálnej) zámene premenných, na také ako obvykle používame v kvantovej mechanike, bude mať tvar:

$$\Psi(x, t) = \varphi(x) \exp(-i\omega t) \quad (6.6)$$

Po dosadení za $\varphi(x)$ z rovnice (6.2) a ak uvážime, že platí vzťah medzi frekvenciou a energiou vlnenia (Einsteinovo vysvetlenie vonkajšieho fotoelektrického javu):

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \quad (6.7)$$

dostaneme (po malej úprave):

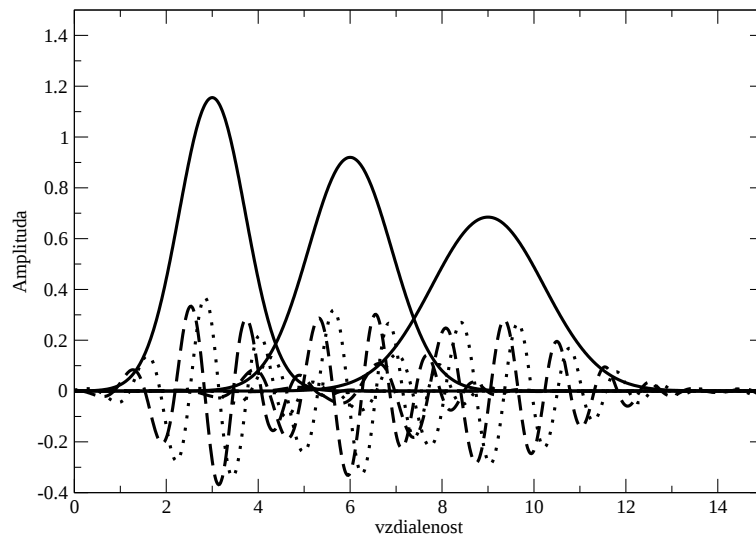
$$\Psi(x, t) = \sum_{p=0}^{\infty} a_p \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(px - E_p t)\right\} \quad (6.8)$$

kde E_p je energia prislúchajúca jednotlivej rovinnnej vlne použitej v rozvoji. Ak teda poznáme počiatočný tvar hustoty rozdelenia pravdepodobnosti, hovoríme tomu, že poznáme počiatočný stav častice, potom vieme použitím rovnice (5.6) - pripomíname, že je to riešenie časovej Schrödingerovej rovnice - predpovedať v akom stave sa bude častica nachádzať v ľubovoľnom neskoršom čase. To nám umožňuje zjednodušiť riešenie časovej Schrödingerovej rovnice minimálne v niektorých špeciálnych prípadoch. Skúsme sa pozrieť čo sa stane ak sa vlnový balík pohybuje v prostredí s nulovým potenciálom. Vtedy časový člen v rovnici (5.6) zabezpečí takú zmenu fáze jednotlivých rovinných vln, že ich výsledok (súčet) sa bude pohybovať v nezmenenej podobe pozdĺž x-ovej osi rýchlosťou, ktorá zodpovedá hybnosti vlnno-častice. Keďže tento pohyb je výsledkom spolupráce veľkého počtu rovinných vln, hovoríme o grupovej rýchlosti. Grupová rýchlosť sa líši od rýchlosti vlny v danom prostredí. Pohyb vlnového balíka v ideálnom prostredí je na obrázku 13a.

V reálnom prostredí závisí rýchlosť pohybu vlny od jej frekvencie. Tomuto javu hovoríme disperzia. V prípade pohybu vlnového balíka sa počiatočná vyváženosť amplitúd a fáz naruší, čo sa prejaví postupným rozplývaním vlnového balíku. Pohyb vlnno-častice v disperznom prostredí je na obrázku 6.2.

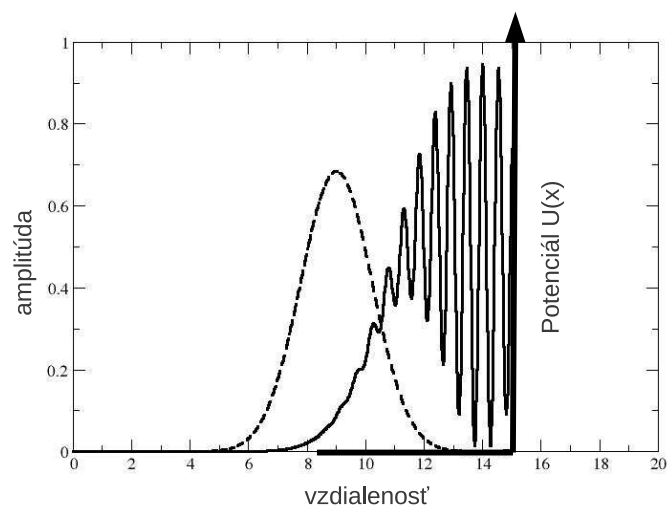
Po vykonaní komplexného násobenia je $P(x)$ reálnou a teda aj merateľnou veličinou. Možnosť riešiť časovú Schrödingerovú rovnicu pomocou rozloženia do radu rovinných vln, nám dovoľuje relatívne jednoducho riešiť aj interakciu vlnového balíku s potenciálom. Necháme totiž v každom okamžiku interagovať jednotlivé rovinné vlny s predpísaným potenciálom a vypočítame prechádzajúcu a odrazenú časť spolu s príslušnými interferenciami. Na záver ich všetky s príslušnou fázou spočítame a dostaneme výsledok interakcie v každom čase. Je to trochu zdĺhavý postup, ale v dobe počítačov ľahko realizovateľný.

Na obrázku 6.3 je nakreslený výsledok interakcie pohybujúceho sa vlnového balíku s nekonečne vysokou potenciálovou bariérou. V tomto prípade nemôž prejsť častica na druhú stranu potenciálu, a preto sa kompletne odráza späť.

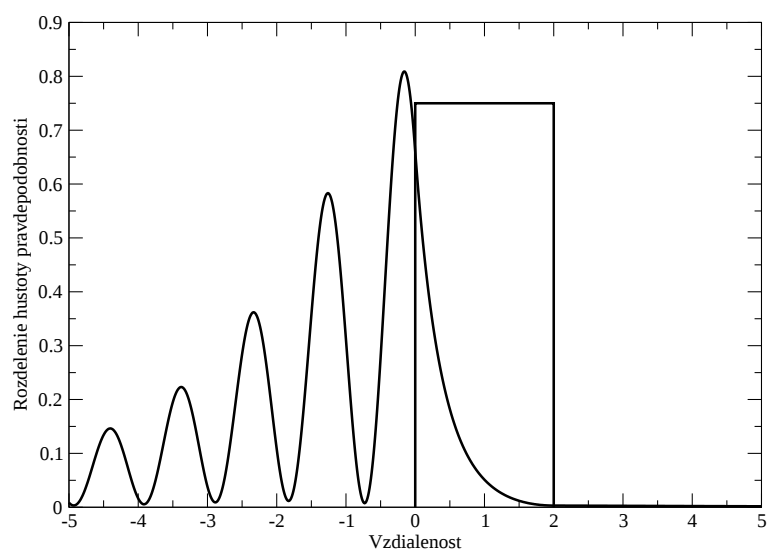


Obr. 6.2: Rozdelenie hustoty pravdepodobnosti pre pohybujúci sa vlnový balík v disperznom prostredí vypočítanej podľa vzťahu (6.8) - plná čiara. Vlnový balík sa pohybuje zľava do prava. Rozširovanie vlnového balíku spôsobuje disperzné prostredie - rýchlosť vlnenia závisí od frekvencie. Celkové rozdelenie $P(x)$ je dané, ako komplexný súčin z reálnej zložky - čiarkovaná čiara a imaginárnej zložky - bodkovaná čiara.

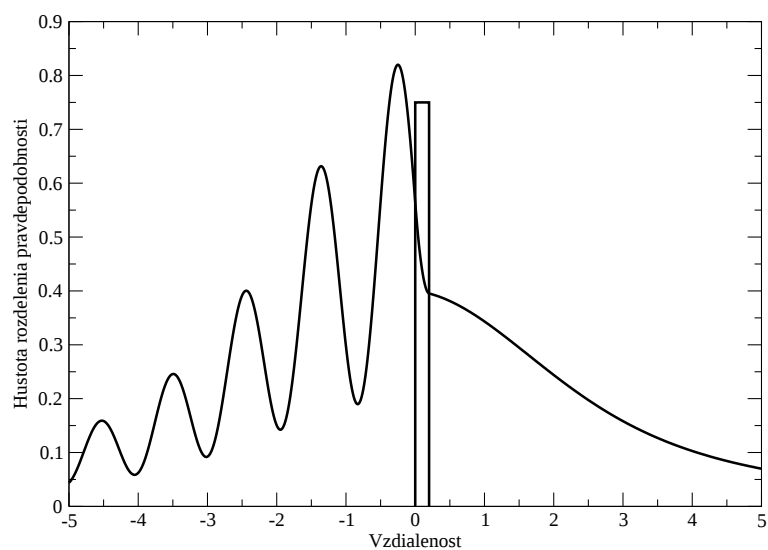
Zvlnenie vzniká, ako dôsledok interferencie medzi prichádzajúcimi a odchádzajúcimi vlnami. V tomto prípade sa vlnový balík pohybuje vysokou rýchlosťou, čo sa prejaví, ako vysoká frekvencia oscilácií pred bariérou. V experimentálnom usporiadaní sa nekonečne vysoký potenciálový schod nedá realizovať a výslednú realizáciu je možné chápať len, ako idealizáciu. V prípade experimentálne realizovateľnej bariéry konečnej výšky, teda konečného potenciálového rozdielu medzi elektródami, možno ovčak'avať čiastočn'e preniknutie častice (vlny) do bariéry. Na obrázku 6.4 je nakreslený výsledok interakcie vlnového balíku s potenciálovou bariérou konečnej výšky. Pri výpočte sme použili napäťový rozdiel $U = 10V$. To, že hodnota rozdelenia hustoty pravdepodobnosti v bariére klesá exponencionálne, nás môže priviesť na myšlienku, že v prípade dostatočne tenkej bariéry môže vlnový balík preniknúť cez bariéru. Na obrázku 6.5 je nakreslená interakcia vlnového balíku s bariérou desať krát kratšej šírky, ako v predchádzajúcom prípade. Skutočne, prechod vlnového balíku je dobre pozorovateľný.



Obr. 6.3: Interakcia prichádzajúceho vlnového balíka s potenciálovou barierou nekonečnej výšky. Zvlnenie funkcie rozdelenia hustoty pravdepodobnosti vzniká, ako dôsledok interferencie prichádzajúcej a odchádzajúcej časti vlnového balíka. Prerušovanou čiarou je nakreslený vlnový balík, ktorý sa nachádza vo vzdialenosti od bariery v ktorej ešte / už neinteraguje s barierou. Bariera je znázornená hrubou plnou čiarou.



Obr. 6.4: Interakcia prichádzajúceho vlnového balíka s potenciálovou barierou konečnej výšky. Zvlnenie funkcie rozdelenia hustoty pravdepodobnosti vzniká, (ako aj v predchádzajúcom prípade) ako dôsledok interferencie prichádzajúcej a odchádzajúcej časti vlnového balíka. Vidieť, že hodnota rozdelenia hustoty pravdepodobnosti v bariere exponenciálne klesá. S bariérou v tomto prípade interaguje menej lokalizovaný vlnový balík. Bariera je znázornená plnou čiarou, ako obdĺžnik.



Obr. 6.5: Interakcia prichádzajúceho vlnového balíka s potenciálovou barierou konečnej výšky. Vidieť, že cez tenkú bariéru častica čiastočne prechádza. Bariéra je znázornená plnou čiarou, ako obdĺžnik.

Kapitola 7

Kvaziklasické priblíženie - WKB aproximácia

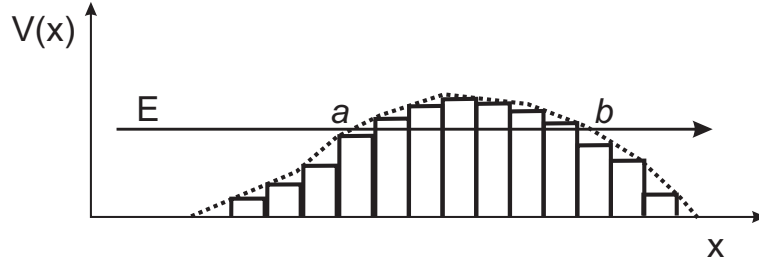
Interakcia s pravouhlým potenciálom je do istej miery idealizácia. Ako sme videli pri našom myslenom experimente s urýchľovacou trubicou, pravouhlý potenciál sa ani nedá vyrobiť. Na druhej strane v reálnych výpočtoch musíme často uvažovať iný ako (približne) pravouhlý potenciál. Pochopiteľne vždy by sa mala vyriešiť Schrödingerova rovnica do ktorej "vložíme" zodpovedajúci tvar potenciálu. Pri jej riešení však mnohokrát narazíme na neprekonateľné technické ťažkosti. Preto boli vyvinuté približné metódy riešenia. Keďže ide o približné riešenie treba mať vždy na pamäti oblasť ich použitia.

Predstavme si, že máme nejako definovaný potenciál pre ktorý potrebujeme určiť koeficienty R a T pre konkrétny vlnový balík a potenciál určený funkciou $U(x)$. Ukazali sme, že vlnový balík sa dá rozložiť do radu rovinných vĺn, a to dokonca v každom prípade. Skúsme urobiť niečo podobné aj s potenciálom $U(x)$ tak, že ho rozdelíme na veľký počet pravouhlých potenciálov:

$$U(x) = \sum_n U_n(x_n, \Delta x) \quad (7.1)$$

kde x_n znamená polohu n -tého pravouhlého potenciálu a Δx jeho šírku. Na obrázku 7.1 je znázornená aproximácia pomocou postupného pridávania pravouhlých potenciálov.

Technickú realizáciu tejto aproximácie si možno predstaviť ako postupné urýchľovanie (prípadne brzdenie) častice v sústave kovových prstencov ako je nakreslené na obrázku 7.2



Obr. 7.1: Rozdelenie obecného potenciálu $V(x)$ do radu pravouhlých potenciálov podľa vzťahu (6.1). Vodorovná čiara označuje energiu a smer interagujúcej častice. Body a a b označujú body v ktorých by sa klasická častica odrazila - hovoríme im body obratu.

V kvaziklasickom priblížení predpokladáme, že častica interaguje s potenciálom len v oblasti medzi bodmi obratu a a b (pozri obrázok 15), tak že na vzdialenosti Δx po prechode potenciálu U_n poklesne amplitúda vlnovej funkcie o:

$$\delta_n = \exp\left\{-\frac{2m}{\hbar^2} [U_n(x_n, \Delta x) - E]^{1/2}\right\} \quad (7.2)$$

kde $U_n(x_n, \Delta x)$ je výška n -tej pravouhlej bariéry. Pokles amplitúdy na n bariérach je potom daný súčinom jednotlivých poklesov:

$$\delta \equiv \prod_n \delta_n = \prod_n \exp\left\{-\frac{2m}{\hbar^2} [U_n(x_n, \Delta x) - E]^{1/2}\right\} \quad (7.3)$$

Posledný výraz použitím vzťahu:

$$\prod_n \exp\{-\alpha_n\} = \exp\left\{-\sum_n \alpha_n\right\} \quad (7.4)$$

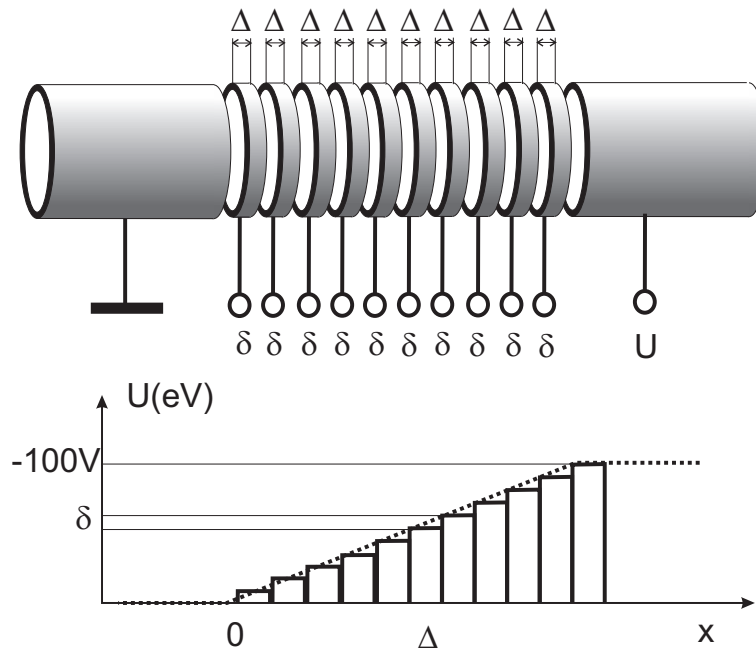
upravíme:

$$\delta = \exp\left\{-\frac{2m}{\hbar^2} \sum_n [U_n(x_n, \Delta x) - E]^{1/2}\right\} \quad (7.5)$$

V limitnom prípade ak $x_n \rightarrow 0$ prejde sumácia na integrovanie a vzťah (7.5) prepíšeme:

$$\delta = \exp\left\{-\frac{2m}{\hbar^2} \int_a^b [U(x) - E]^{1/2} dx\right\} \quad (7.6)$$

kde integrujeme v intervale medzi bodmi obratu. Naznačený postup riešenia Schrödingerovej rovnice je odvodený z výpočtov, ktoré uskutočnili P.Wentzel, H.A.Kramers a L.Brillouin a názov metódy pochádza z počiatočných písmen mien autorov - WKB priblíženie. Toto priblíženie je kváziklasické. Preto je



Obr. 7.2: Zariadenie na postupné urýchľovanie častice v sústave prstencov (a) tak aby sme aproximovali postupný nárast potenciálu $U(x)$ (b).

jeho platnosť obmedzená na oblasti ďaleko od bodov obratu, kde dáva dobré výsledky. Vo vzťahu (7.6) však vystupuje integrál v hraniciach medzi bodmi obratu. Priblíženie sa dá použiť v prípade ak okolia bodov obratu tvoria len malú časť celého potenciálu. To je splnené pre potenciály široké (vzhľadom na vlnovú dĺžku častice) a málo strmé. Istú analógiu obmedzenia oblasti použitia možno nájsť na obrázku 16. Ak v našom experimentálnom zariadení chceme aproximovať strmo sa meniaci potenciál, budeme zvyšovať napätie medzi prstencami ΔU . Pri určitej hodnote napätia medzi prstencami nastane výboj. Ak chceme ísť s napätím nad túto hodnotu, musíme zväčšiť medzeru Δx . Tým však deformujeme pôvodne "pravouhlý" potenciál a WKB aproximácia nedá dobrý výsledok.

7.1 Presnejšie odvodenie WKB priblíženia

WKB metóda ja na rozdiel od metódy prenosových matíc analytická metóda, ktorá sa používa na riešenie diferenciálnych rovníc. Ide v podstate o hľadanie oscilujúceho riešenia, ktorého vlnová dĺžka sa malo mení na vzdialenosti jed-

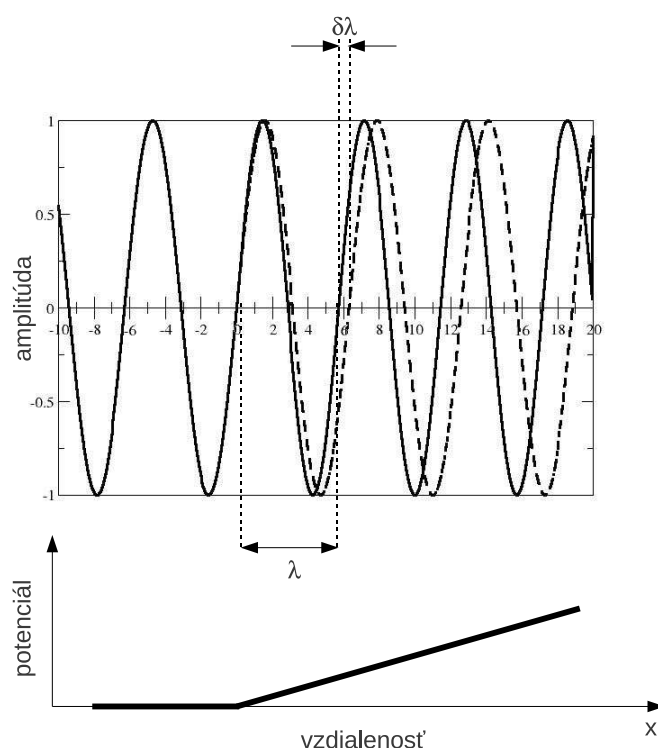
nej vlnovej dĺžky. Matematicky možno tento fakt vyjadriť nasledovne:

$$\delta\lambda = \frac{d\lambda}{dx}\delta x \rightarrow \delta\lambda = \frac{d\lambda}{dx}\lambda \quad (7.7)$$

WKB metódu je možné použiť v prípade ak:

$$\left|\frac{\delta\lambda}{\lambda}\right| \equiv \left|\frac{d\lambda}{dx}\right| \ll 1 \quad (7.8)$$

Schématicky je tento predpoklad zobrazený na obrázku 7.3. Z predchádza-



Obr. 7.3: Scématické naznačenie zmeny vlnovej dĺžky vlny (horný obrázok) na pomaly sa meniacom potenciáli (dolný obrázok).

júceho výkladu o princípoch kvantovej mechaniky je známe, že zmena vlnovej dĺžky vlnovej funkcie závisí od tvaru potenciálu s ktorým interaguje. Na základe takéhoto poznania skúsme teraz odhadnúť podmienku pre zmenu potenciálu, pre ktorý je možné WKB priblíženie použiť. Pre hybnosť p platí:

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (7.9)$$

Po povýšení oboch strán rovnice (7.9) na druhú:

$$p^2 = \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 \equiv 2m(E - U) \quad (7.10)$$

Použijúc rovnicu (7.7) možno napísať ak zmeníme λ za druhú mocninu λ :

$$\frac{d(\lambda^2)}{dx} = -\frac{h^2}{p^4} \frac{d(p^2)}{dx} = -\frac{h^2}{p^4} \left(-2m \frac{dV(x)}{dx}\right) \quad (7.11)$$

Alebo po úprave:

$$\frac{d\lambda}{dx} = \frac{mh}{p^3} \frac{dV(x)}{dx} \quad (7.12)$$

Takže podmienka (7.7) pre použitie WKB priblíženia v závislosti od tvaru potenciálu má tvar:

$$\left|\frac{\delta\lambda}{\lambda}\right| = \left|\frac{mh}{p^3} \frac{dV(x)}{dx}\right| \ll 1 \quad (7.13)$$

Z podmienky (7.13) vidno, že WKB priblíženie s naprostou istotou nefunguje v blízkosti skokového potenciálu, kde $\left|\frac{dV(x)}{dx}\right| = \infty$.

Ukážme riešenie pomocou WKB priblíženia na prípade Schrödingerovej rovnice:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + V(x)\psi(x) = E\Psi(x) \quad (7.14)$$

ktorú budeme uvažovať v tvare (po malej úprave):

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) \Psi(x) \quad (7.15)$$

Keďže uvažujeme len málo sa meniaci potenciál, možno riešenie hľadať v tvare voľnej častice, ktoré neskôr rozvineme do radu.

$$\Psi(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar}\Phi(x)} \quad (7.16)$$

kde $\Phi(x) = px$. Po dosadení (7.16) do rovnice (7.15) dostaneme:

$$-i\hbar \frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} + \left(\frac{d\Phi}{dx}\right)^2 = p^2(x) \quad (7.17)$$

kde:

$$p^2 = 2m(E - V(x)) \quad (7.18)$$

Rozvineme teraz $\Phi(x)$ do radu, za predpokladu, že $\hbar \rightarrow 0$:

$$\Phi(x) = \Phi_0(x) + \hbar\Phi_1(x) + \frac{\hbar^2}{2}\Phi_2(x) + \dots \quad (7.19)$$

Po dosadení do rovnice (7.17) a malej úprave dostaneme:

$$\begin{aligned}
0 &= \left\{ \left(\frac{d\Phi_0(x)}{dx} \right)^2 - p(x)^2 \right\} \\
&+ 2\hbar \left\{ \frac{d\Phi_0(x)}{dx} \frac{d\Phi_1(x)}{dx} - \frac{i}{2} \frac{d^2\Phi_0(x)}{dx^2} \right\} \\
&+ \hbar^2 \left\{ \frac{d\Phi_0(x)}{dx} \frac{d\Phi_2(x)}{dx} + \left(\frac{d\Phi_1(x)}{dx} \right)^2 - i \frac{d^2\Phi_1(x)}{dx^2} \right\} + O(\hbar^3) \quad (7.20)
\end{aligned}$$

Táto rovnica musí byť splnená pre ľubovoľnú hodnotu $\hbar$. Toho vyplývajú nasledujúce rovnice:

$$\left(\frac{d\Phi_0(x)}{dx} \right)^2 = p^2(x) \quad (7.21)$$

$$\frac{d\Phi_0(x)}{dx} \frac{d\Phi_1(x)}{dx} = \frac{i}{2} \frac{d^2\Phi_0(x)}{dx^2} \quad (7.22)$$

$$\frac{d\Phi_0(x)}{dx} \frac{d\Phi_2(x)}{dx} + \left(\frac{d\Phi_1(x)}{dx} \right)^2 = i \frac{d^2\Phi_1(x)}{dx^2} \quad (7.23)$$

Integrovaním rovnice (7.21) dostaneme vzťah pre $\Phi_0(x)$:

$$\Phi_0(x) = \pm \int_{x_0}^x p(x') dx' \quad (7.24)$$

Alebo vo vyjadrení pre vlnový vektor $k(x) = p(x)/\hbar$:

$$\frac{\Phi_0(x)}{\hbar} = \pm \int_{x_0}^x k(x') dx' \quad (7.25)$$

Po dosadení rovnice (7.25) do rovnice (7.22) dostaneme vzťah pre $\Phi_1(x)$:

$$\Phi_1(x) = \frac{i}{2} \ln \left(\frac{d\Phi_0(x)}{dx} \right) \quad (7.26)$$

alebo vo vyjadrení pre vlnový vektor $k(x) = p(x)/\hbar$:

$$\Phi_1(x) = \frac{i}{2} \ln(\hbar k) \quad (7.27)$$

V exponenciálnom vyjadrení poslednú rovnicu napíšeme takto:

$$e^{i\Phi_1(x)} = \frac{1}{\sqrt{\hbar k}} \quad (7.28)$$

Vyjadrenie pre $\Phi(7.52)a(7.57)_2(x)$ dostaneme integrovaním rovnice (7.23) tak, že postupne použijeme rovnice (7.25) pre $\Phi_0(x)$ a (7.28) pre $\Phi_1(x)$:

$$\Phi_2(x) = \frac{1}{2} \frac{m}{p(x)^3} \frac{dV(x)}{dx} - \frac{1}{4} \int \left\{ \frac{m^2}{p(x)^5} \left(\frac{dV}{dx} \right)^2 \right\} dx \quad (7.29)$$

Vidíme, že druhý člen rozvoja (7.19) je vyjadrený, ako logaritmus derivácie prvého člena rozvoja a preto ho vo všeobecnosti nemožno zanedbať. Tretí člen rozvoja $\Phi_2(x)$ obsahuje deriváciu potenciálu $V(x)$ a možno ho zanedbať, ak je splnená podmienka kvaziklasického priblíženia (7.13). Ak teda vložíme vyjadrenia pre $\Phi_0(x)$ a $\Phi_1(x)$ do substitúcie (7.16) dostaneme pre riešenie Schödingrovej rovnice $\Psi(x)$ vo WKB priblížení vzťah:

$$\Psi(x) = \frac{A}{\sqrt{k}} e^{(i \int k(x') dx')} + \frac{B}{\sqrt{k}} e^{(-i \int k(x') dx')} \quad (7.30)$$

Keďže druhý člen v poslednej rovnici pre integrovanie vo veľkej vzdialenosti od bodov obratu možno zanedbať dostaneme výsledný vzťah:

$$\Psi(x) = \frac{A}{\sqrt{k}} e^{(i \int k(x') dx')} \quad (7.31)$$

Pre výpočet koeficientu transmisie vnočastice cez bariéru z definície:

$$T = \left| \frac{\Psi_{III}}{\Psi_I} \right|^2 \quad (7.32)$$

kde Ψ_I je vlna ďaleko pred bariérou a Ψ_{III} je vlna ďaleko za bariérou. Ak ešte dosadíme správny výraz pre výpočet vlnového vektora k :

$$k(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)} \quad (7.33)$$

dostaneme pre koeficient transmisie vo WKB priblížení:

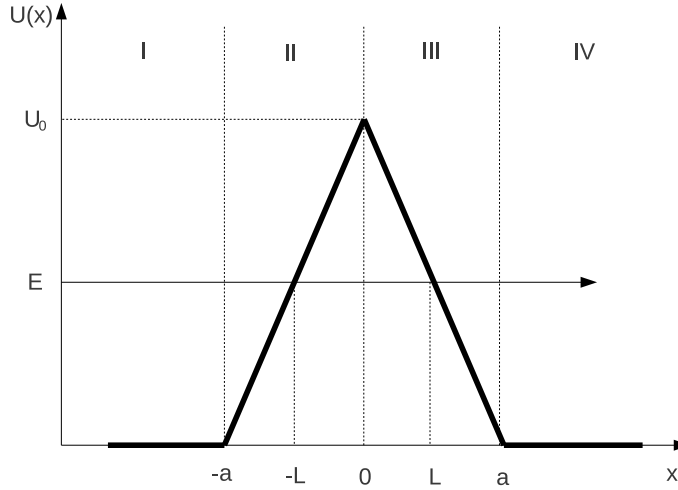
$$T = e^{-2 \int_a^b \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)} dx} \quad (7.34)$$

kde a a b sú body obratu.

7.2 Porovnanie presného a približného (WKB) riešenia

Predpokladajme existenciu jednorozmerného zariadenia v ktorom v smere osi x napätia rovnomerne narastá od bodu a do bodu s . Od bodu s napätia rovnomerne klesá, až v bode b dosiahne nulovú hodnotu. Priebeh napätia $U(x)$ je schématicky naznačený na obrázku 7.4.

V prípade symetrického trojuholníkového priebehu si ďalší opis zjednodušíme, ak posunieme x -sovú os tak, aby bola nula v strede bariery. Potom lahko



Obr. 7.4: Schématické znázornenie priebehu brzdného napätia v jednorozmernom zariadení, v ktorom tunelujú elektróny. Zariadenie je rozdelené na štyri oblasti; I. oblasť pred bariérou; II. oblasť nárastu napätia; III. oblasť poklesu napätia; IV. oblasť za bariérou. Body $-L$ a L označujú body obratu. Ich poloha závisí od energie interagujúcej častice.

matematicky popíšeme priebeh potenciálu (napätia) takto:

$$U(x) = 0 \quad (7.52)a(7.57) \quad x < -a \quad (7.35)$$

$$U(x) = U_0\left(1 + \frac{x}{a}\right) \quad -a \leq x < 0 \quad (7.36)$$

$$U(x) = U_0\left(1 - \frac{x}{a}\right) \quad 0 \leq x < a \quad (7.37)$$

$$U(x) = 0 \quad x \geq a \quad (7.38)$$

Pre ďalšie zjednodušenie zaveďme nové premenné:

$$k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad q_0^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2} \quad (7.39)$$

kde E je energia častice. Teraz môžeme v jednotlivých oblastiach napísať

Schödingerovu rovnicu v príslušnom tvare:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + k_0^2\Psi(x) = 0 \quad x < -a \quad (7.40)$$

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} - (q_0^2 - k_0^2 + q_0^2\frac{x}{a})\Psi(x) = 0 \quad -a \leq x < 0 \quad (7.41)$$

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} - (q_0^2 - k_0^2 - q_0^2\frac{x}{a})\Psi(x) = 0 \quad 0 \leq x < a \quad (7.42)$$

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + k_0^2\Psi(x) = 0 \quad x \geq a \quad (7.43)$$

Z dôvodu ďalšieho zjednodušenia zavedme v rovniciach (7.41) a (7.42) substitúcie:

$$\zeta = (\frac{a}{q_0^2})^{\frac{2}{3}}(q_0^2 - k_0^2 + q_0^2\frac{x}{a}) \quad (7.44)$$

$$\eta = (\frac{a}{q_0^2})^{\frac{2}{3}}(q_0^2 - k_0^2 - q_0^2\frac{x}{a}) \quad (7.45)$$

Použijúc tieto substitúcie môžeme rovnice (7.41) a (7.42) napísať v tvare:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} - \zeta\Psi(x) = 0 \quad (7.46)$$

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} - \eta\Psi(x) = 0 \quad (7.47)$$

Ide o dve rovnice, ktoré sú formálne podobné harmonickým rovniciam. Podstatný rozdiel je v znamienku - v harmonickej rovnici je plus a tu je mínus. Riešením rovníc (7.46) a (7.47) sú Airiho funkcie $Ai(x)$ a $Bi(x)$. Ich priebeh je znázornený na obrázku 7.5. Riešenie budeme, tak ako v prípade potenciálového skoku hľadať v rozličnom tvare podľa toho v ktorej oblasti sa nachádzame.

$$\Psi(x) = e^{ik_0x} + \alpha e^{-ik_0x} \quad x < -a \quad (7.48)$$

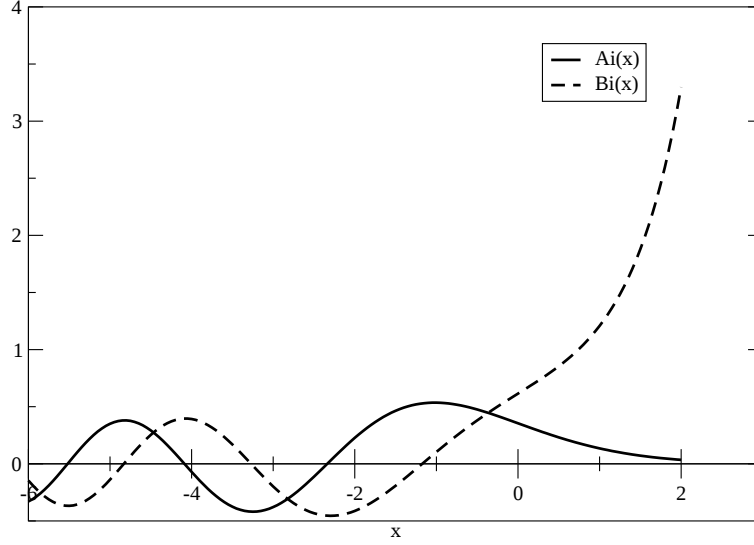
$$\Psi(x) = \beta Ai(\zeta) + \gamma Bi(\zeta) \quad -a \leq x < 0 \quad (7.49)$$

$$\Psi(x) = \delta Ai(\eta) + \epsilon Bi(\eta) \quad 0 \leq x < a \quad (7.50)$$

$$\Psi(x) = \vartheta e^{ik_0x} \quad x \geq a \quad (7.51)$$

kde $\alpha, \beta, \gamma, \epsilon, \vartheta$ sú konštanty, ktoré treba určiť. Pri ich určovaní budeme postupovať štandardne. Položíme do rovnosti riešenia a ich derivácie v hraniciach oblastí - v bodoch pre ktoré platí $x = -a$, $x = 0$ a $x = a$. Po dlhšom výpočte

Priebeh Airy-ho funkcie



Obr. 7.5: Priebeh Airy-ho funkcií $Ai(x)$ a $Bi(x)$.

dostaneme šesť rovníc pre šesť premenných:

$$e^{-ik_0a} + \alpha e^{ik_0a} = \beta Ai(-\varrho) + \gamma Bi(-\varrho) \quad (7.52)$$

$$i\sqrt{\varrho}(e^{-k_0a} - \alpha e^{ik_0a}) = \beta Ai'(-\varrho) + \gamma Bi'(-\varrho) \quad (7.53)$$

$$\beta Ai(\mu) + \gamma Bi(\mu) = \delta Ai(\mu) + \epsilon Bi(\mu) \quad (7.54)$$

$$\beta Ai'(\mu) + \gamma Bi'(\mu) = -\delta Ai'(\mu) - \epsilon Bi'(\mu) \quad (7.55)$$

$$\delta Ai(-\varrho) + \epsilon Bi(-\varrho) = \vartheta e^{ik_0a} \quad (7.56)$$

$$\delta Ai'(-\varrho) + \epsilon Bi'(-\varrho) = -i\sqrt{\varrho}\vartheta e^{ik_0a} \quad (7.57)$$

kde: $Ai'(x) = \frac{dAi(x)}{dx}$ a $Bi'(x) = \frac{dBi(x)}{dx}$. Pre zjednodušenie zápisu rovníc (7.52) až (7.57) sme zaviedli nasledujúce premenné:

$$\varrho \equiv k_0^2 a^{\frac{2}{3}} q_0^{-\frac{4}{3}} = (q_0 a)^{\frac{2}{3}} \left(\frac{k_0}{q_0}\right)^2 \quad (7.58)$$

$$\mu \equiv a^{\frac{2}{3}} q_0^{-\frac{4}{3}} (q_0^2 - k_0^2) = (q_0 a)^{\frac{2}{3}} \left(1 - \frac{k_0^2}{q_0^2}\right) \quad (7.59)$$

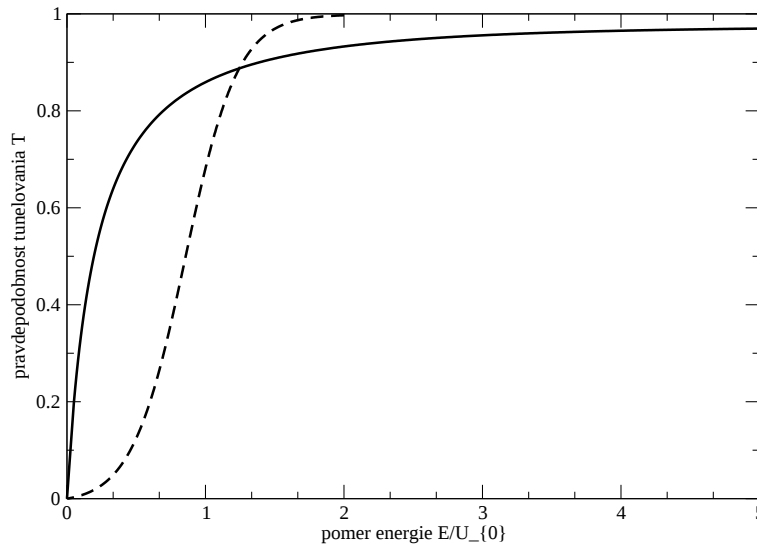
Rovnice (7.52) až (7.57) tvoria sústavu rovníc, kde počet rovníc sa rovná počtu premenných a teda sú vo všeobecnosti riešiteľné. Ak ešte použijeme identitu platnú pre Airyho funkcie:

$$Ai'(x)Bi(x) - Ai(x)Bi'(x) = 1 \quad (7.60)$$

(čo je nieč, ako $\sin^2(x) + \cos^2(x) = 1$ pre harmonické funkcie), môžeme napísať záverečný vzťah pre pravdepodobnosť tunelovania:

$$T \equiv |\vartheta|^2 = \frac{\varrho}{\{[Bi(\mu)Ai'(-\varrho) - Ai(\mu)Bi(-\varrho)]^2 + \varrho[Bi(\mu)Ai(-\varrho) - Ai(\mu)Bi(-\varrho)]^2\}} \times \frac{1}{\{[Bi'(\mu)Ai'(-\varrho) - Ai'(\mu)Bi(-\varrho)]^2 + \varrho[Bi'(\mu)Ai(-\varrho) - Ai'(\mu)Bi(-\varrho)]^2\}} \quad (7.61)$$

Ten vzťah je veľmi komplikovaný, takže ho nebudeme tušovať. Zjednodušíme ho, ak použijeme predpoklad, že vlnová dĺžka je veľká v porovnaní s šírkou bariery, t.j. $\lambda \gg a$. V tomto prípade môžeme použiť WKB priblíženie.



Obr. 7.6: Pravdepodobnosť tunelovania cez tenkú (1 nm) trojuholníkovú bariery. Plná čiara znázorňuje presný výpočet podľa vzťahu (7.61), čiarkovaná čiara predstavuje WKB priblíženie.

Teraz sa pozrime ako možno riešenie vyjadrené vzťahom (7.61) zjednodušiť, ak uvažujeme s pomaly sa meniacim potenciálom, alebo (čo je ekvivalentné) s málo sa meniacou vlnovou dĺžkou - kritérium (7.8). Vlnovú dĺžku v závislosti od energie vlnčastice E a potenciálu $U(x)$ s ktorým interaguje možno napísať takto:

$$\lambda(x) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m[E - U(x)]}} \quad (7.62)$$

Za predpokladu málo sa meniacej vlnovej dĺžky na vzdialenosti jednej vlnovej dĺžky. To platí v oblastiach $x < -a$ a $x > a$ kde možno použiť kváziklasické priblíženie. V tejto oblasti možno prijať tieto predpoklady:

$$\lambda(x) = \frac{1}{k_0} \rightarrow \frac{d\lambda(x)}{dx} = 0 \quad (7.63)$$

v oblasti $-a \leq x \leq a$ pre zmenu vlnovej dĺžky platí:

$$\lambda(x) = \left(\frac{a}{q_0^2}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{i\sqrt{\zeta}} \rightarrow \frac{d\lambda}{dx} \equiv \frac{d\lambda}{d\zeta} \frac{d\zeta}{dx} = -\frac{1}{2i\zeta^{\frac{3}{2}}} \quad (7.64)$$

$$\lambda(x) = \left(\frac{a}{q_0^2}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{i\sqrt{\mu}} \rightarrow \frac{d\lambda}{dx} \equiv \frac{d\lambda}{d\mu} \frac{d\mu}{dx} = -\frac{1}{2i\mu^{\frac{3}{2}}} \quad (7.65)$$

Z podmienky kváziklasickosti $|\frac{d\lambda}{dx}| \lll 1$ dostaneme:

$$\begin{aligned} |\zeta| &\ggg 1 \\ |\eta| &\ggg 1 \end{aligned} \quad (7.66)$$

Použijúc podmienky (7.66) môžeme pre Airyho funkcie vystupujúce vo vzťahu (7.61) použiť asymptotické rozvoje ($t \ggg 1$, $x \equiv \frac{2}{3}t^{\frac{3}{2}}$):

$$\begin{aligned} Ai(t) &\approx t^{-\frac{1}{4}}e^x & Ai'(t) &\approx t^{\frac{1}{4}}e^x \\ Bi(t) &\approx \frac{1}{2}t^{-\frac{1}{4}}e^{-x} & Bi'(t) &\approx -\frac{1}{2}t^{-\frac{1}{4}}e^{-x} \end{aligned} \quad (7.67)$$

$$\begin{aligned} Ai(-t) &\approx t^{-\frac{1}{4}}\cos(x + \frac{\pi}{4}) & Ai'(-t) &\approx t^{\frac{1}{4}}\sin(x + \frac{\pi}{4}) \\ Bi(-t) &\approx t^{-\frac{1}{4}}\sin(x + \frac{\pi}{4}) & Bi'(-t) &\approx -t^{\frac{1}{4}}\cos(x + \frac{\pi}{4}) \end{aligned} \quad (7.68)$$

Po dosadení asymptotických rozvojev do (7.61) dostaneme:

$$T \approx e^{-\frac{8}{3}\mu^{\frac{3}{2}}} = e^{-\frac{8}{3}\frac{a\sqrt{2m}}{\hbar U_0}(U_0-E)^{\frac{3}{2}}} \quad (7.69)$$

Vzťah (7.69) možno upraviť na známy tvar:

$$T \approx e^{-2 \int_{-L}^L \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|U(x)-E|} dx} \quad (7.70)$$

Na obrázku 7.6 je priebeh pravdepodobnosti T ako funkcia energie vlnočastice počítanej podľa vzťahu (7.70) vynesenej prerušovanou čiarou. Pre úzky potenciál vidíme podstatný rozdiel medzi presným riešením a WKB priblížením.

Kapitola 8

Záver

V našom rozprávaní o princípoch kvantovej mechaniky sme prešli síce krátke časové ale z pohľadu ľudského ducha nesmierne dôležité obdobie objavovania a vysvetľovania veľmi podstatných vlastností sveta v ktorom žijeme. Ukázalo sa, že matematický aparát a výsledky experimentov pripravených v 19. storočí boli schopné podať vyčerpávajúce vysvetlenie hlbokých zákonitostí mikrosвета, sveta ktorý je vzdialený našim každodenným skúsenostiam. Formovanie predstáv kvantovej mechaniky sa líši od formovania predstáv klasickej mechaniky. Klasická mechanika je deterministická a kauzálna teória. Deterministická preto, lebo pri danom stave sústavy vieme jednoznačne určiť hodnotu ľubovoľnej veličiny, bez toho aby sme menili v procese skúmania stav sústavy (ak samozrejme v procese merania neopatrnosťou nespôsobíme požiar alebo výbuch - ale za to klasická teória nemôže). Kauzálna je v tom, že z presnej a úplnej informácie o stave sústavy vieme určiť jej vývoj do budúcnosti ale aj jej chovanie sa v minulosti. Známy je výrok d'Alemberta, ktorý v nadšení s vývojom teoretickej mechaniky, povedal "Dajte mi polohy a hybnosti všetkých atómov vo vesmíre a ja vám vypočítam dejiny sveta od jeho stvorenia až do chvíle keď na hore Golgota postaví kríž (súdny deň)". Na dobu v ktorej d'Alembert žil to bolo do istej miery odôvodnené vyhlásenie. Ale aj do istej časti pesimistický, pretože predpovedal že osud každého z nás je určený čiste mechanickými princípmi a v budúcnosti ho bude možné "vypočítať". Neskorší vývoj vo fyzike ukázal na obrovskú variabilitu pravdepodobností, ktorá "riadi" svet okolo nás.

V našom rozprávaní sme sa zamerali na pohyb mikroskopickej častice v jednom rozmere. Je to tak ako by sme mechaniku telesa obmedzili len na rovnomerný pohyb po priamke. Vôbec sme nespomenuli pohyb po kružnici (až na pár argumentov o stabilnej dráhe elektrónu pri jeho pohybe po atómovom orbitáli), moment hybnosti a spin elektrónu. To ani nebolo naším cieľom. Zamerali sme sa na niektoré súvislosti medzi optikou a kvantovou

mechanikou a čiastočnou interpretáciou výsledkov. Hlavne sme spomenuli tunelovanie - fascinujúcu vlastnosť mikrosвета, ktorá však práve použitím matematických (Fourierova transformácia) a optických (Kifchhoff) objavov 19. storočia môže byť dobre pochopená a akceptovaná.