Cvičení 24. 3. 2021

Téma: Volná částice a částice v jámě

Volná částice

Vlnová funkce volné částice letící (1D) prostorem s hybností p je rovinná vlna $\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar}$. Částici, která zabírá prostor tzv. "od nevidim do nevidim" je trochu těžší si představit, někdy proto pracujeme spíš s tzv. vlnovým balíkem, což je gaussovka složená z rovinných vln. Další možností je použít periodické okrajové podmínky, tedy částici prostor omezíme jen na určitý interval, typicky $(0, L)$. V tomto případě nejsou ale možné hodnoty hybnosti spojité, ale diskrétní, což nyní ukážeme. *Pozn.: Pokud představa periodických okrajových podmínek moc nepomáhá, můžeme si představit částici obíhající bod v dané vzdálenosti. Tedy něco jako Bohrův model atomu vodíku. Případně jiný rotující objekt. Vlnová funkce takovéto věci také musí být periodická, jen nyní na intervalu* $(0, 2\pi)$ *odpovídající možným úhlům při rotaci dokola.*

▷ Uvažujme rovinnou vlnu tvaru $\psi_k(x) = Ne^{ikx}$, k je vlnový vektor. Při periodických okrajových podmínkách musí platit $\psi_k(x + L) = \psi_k(x)$, kde L je délka intervalu. Jaké jsou možné hodnoty k? Jak vypadají možné vlnové funkce? (Řešení na IV-1.)

▷ Vypočtěte normovací faktor N. (Řešení na IV-1.)

▷ Ověřte, že $\psi_k(x)$ je vlastní funkce hybnosti a kinetické energie. Načrtněte maticovou reprezentaci těchto operátorů v bázi (povolených) rovinných vln. (Řešení na IV-2.)

Báze rovinných vln je velmi užitečná, například nám umožňuje vyjádřit spojité funkce na intervalu $(0, L)$. Tedy funkci $f(x)$ vyjádříme pomocí rozvoje $f(x) = \sum_{n\in Z} c_n Ne^{ik_nx}$, kde c_n jsou koeficienty rozvoje. Této transformaci říkáme Fourierova. *Pozn.: Transformaci také říkáme spektrální neboť nám dává spektrum frekvencí, které se v signálu (časovém nebo prostorovém) vyskytují. V našem uchu je tak zvuk převáděn na tóny, v oku zase světlo na barvy, tedy různé frekvence vlnění.*

Použijeme nyní volnou částici na intervalu $(0, L)$ a budeme uvažovat operátor $V = A\sin(2\pi x/L)$. Tento problém odpovídá například modelu pevné látky, kterou si můžeme představit (tak trochu) jako volné valenční elektrony pobíhající v potenciálu jader a elektronů v silně vázaných slupkách. Pro nabitou částici obíhající bod (rotátor) odpovídá operátor V aplikaci homogenního elektrického pole.

▷ Vypočtěte maticovou reprezentaci operátoru V, tedy $\langle n|V|m\rangle$ pro libovolné n a m. (Řešení na IV-7.)

▷ Pro rychlíky: Vlnové funkce $\psi_{+,n} = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos(2\pi nx/L)$, $n \in N^0$ a $\psi_{-,n} = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(2\pi nx/L)$, $n \in N$ jsou také vlastní stavy kinetické energie. Jaká je maticová reprezentace operátoru V v bázi těchto stavů? Nejprve si integrály nakreslete, opět většina z nich vyjde nula.

▷ Systém s Hamiltoniánem $H = T + V$ nemá jednoduché řešení. Toto je v kvantové mechanice normální. Zamyslíme se nad tím, jak bychom mohli vypočítat přibližně energii základního stavu. Pro rychlíky: Diagonalizujte 2×2 matici Hamiltoniánu $H = T + V$ v bázi stavů $\psi_{+,0}$ a $\psi_{-,n}$ (stačí vlastní čísla). Čemu odpovídá výsledek?

Částice v nekonečné jámě

Uvažujme nyní částici v potenciálu, který je nulový na intervalu $(0, L)$, ale nekonečný mimo tento interval. Částice se tak může pohybovat jen mezi bariérami. Jelikož je Hamiltonián na intervalu $(0, L)$ jen $H = T$, musejí být vlastní funkce vlastními funkcemi kinetické energie. (Schrödingerova rovnice platí pro každý bod.) Navíc musí být vlastní funkce spojitá, tedy musí být rovna nule pro koncové body intervalu, t.j. $\psi(0) = 0$ a $\psi(L) = 0$.

▷ Vlastní stavy kinetické energie známe, jsou stavy $\psi_k(x) = Ne^{ikx}$ také vlastní stavy pro nekonečnou jámu? Pokud ne, jak je můžeme upravit, abychom splnili okrajové podmínky? (Řešení na IV-2.)

▷ Jsou vlastní stavy jámy také vlastní stavy hybnosti? (Řešení na IV-2.)

▷ Jaká je energie vlastních stavů v nekonečné jámě? (Řešení na IV-2.)

Model nekonečné jámy je velmi užitečný, například v případě, že máme relativně volný, ale prostorově omezený, elektron, který můžeme excitovat. Takovéto elektrony můžeme potkat například v krystalech solí (tzv. barevná centra), nanočásticích nebo konjugovaných molekulách. Model nekonečné jámy nám potom může pomoci **přibližně** vypočítat excitační a deexcitační energie. Ukážeme si to na příkladu.

▷ Uvažujme elektron v nekonečné jámě o šíři L. Jaká je energie základního a prvního excitovaného stavu? Jaký je jejich rozdíl, tedy (de-)excitační energie? Pokud excitovaný elektron při deexcitaci vyzáří foton, jaká musí být šíře jámy, abychom ho viděli? (Oko je citlivé přibližně na záření s vlnovými délkami mezi 380 a 700 nm.) Výpočet je jednodušší provést při použití atomových jednotek, kdy $\hbar = m_e = |e| = 1$, rychlost světla je pak $c \approx 137$. Jednotka délky je jeden Bohr $a_\mathrm{B} = 0.0529$ nm, potom 1 nm je roven přibližně 18.9 a_B. Jednotka energie je Hartree, přičemž 1 Ha = 2 Ry(dbergy) $\approx$ 27.2 eV. Energii fotonu vypočteme z $E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda}$. Excitační energie by měla vyjít v řádu nižších elektronvoltů. (Řešení na IV-3.)

Principu superpozice nám říká, že stav můžeme rozložit do báze jiných stavů, například do báze vlastních stavů daného problému:

$$\Psi = \sum_n c_n \phi_n$$

Pokud jsou ϕ_i vlastní stavy časově nezávislého Hamiltoniánu, tak z časové Schrödingerovy rovnice plyne, že stav se v čase vyvíjí jako

$$\Psi = \sum_n c_n \phi_n e^{-iE_n t/\hbar}.$$

Uvažujme částici v nekonečné jámě ve stavu $\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2)$, kde ϕ_n jsou jednotlivé vlastní stavy nekonečné jámy. Interval opět $(0, L)$.

▷ Jaká je časová závislost hustoty pravděpodobnosti výskytu částice? (Řešení na IV-8.)

▷ Jaká je časová závislost energie částice? (Řešení na IV-4.)

▷ Jaká je časová závislost hybnosti částice? (Řešení na IV-5 a IV-6.)