

## 4 JEDNODUCHÉ SÚSTAVY

### 4.1 ÚVOD

V predchádzajúcich kapitolách sme videli, že spomedzi možných stavov fyzikálnej sústavy majú význačnú úlohu vlastné stavy operátora energie. V tejto kapitole sa preto budeme zaoberať riešeniami bezčasovej Schrödingerovej rovnice pre niekoľko jednoduchých jednočasticových sústav. Niektoré z týchto sústav sú samé osebe veľmi dôležité (napr. atóm vodíka či lineárny harmonický oscilátor), iné sú užitočným priblížením úloh, ktoré sa vyskytujú v praxi (častica v potenciálovej jame, prechod cez pravouhlú bariéru). Všetky tieto príklady budú slúžiť ako ilustrácia „remesla“, t. j. metód a techník používaných pri riešení zložitejších problémov. Znalosť „remesla“ je veľmi dôležitá, pretože fyzik predsa len trochu „myslí rukou“ práve tak, ako maliar, či sochár a bez praktickej skúsenosti s riešením úloh a problémov sotva možno skutočne rozumieť fyzikálnej teórii.

### 4.2 VIAZANÉ A ROZPTYLOVÉ STAVY

Riešenia bezčasovej SchR

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (1)$$

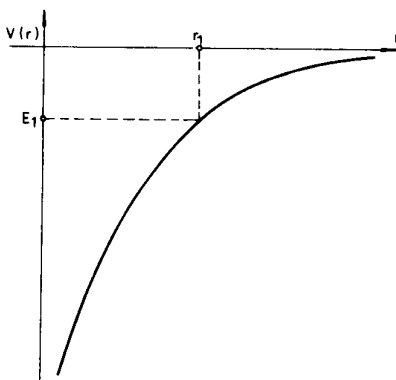
môžeme rozdeliť do dvoch skupín. Prvá z nich odpovedá viazaným, druhá rozptylovým stavom.

Tento rozdiel vystupuje aj v klasickej mechanike. Uvažujme napríklad klasický pohyb telesa v silovom poli s potenciálnou energiou  $V(\mathbf{r})$  (obr. 4.1). (Názorne si môžeme predstaviť napríklad pohyb telies v centrálnom gravitačnom poli Slnka). Potenciálna energia je všade záporná a pre  $r \rightarrow \infty$  máme  $V(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ . Pre viazané stavy, alebo ako sa v klasickej mechanike hovorí, pre finitný pohyb, je celková energia  $E$  telesa záporná  $E < 0$ . Takéto teleso sa pri svojom pohybe nemôže vzdialiť od začiatku do ľubovoľnej vzdialenosti. V každom bode dráhy telesa totiž platí

$$E = E_{\text{kin}} + V(\mathbf{r}) < 0$$

a teleso sa nemôže dostať do tých oblastí v priestore, ktoré by zodpovedali zápornej kinetickej energii. Na obr. 4.1 je znázornená vzdialenosť  $r_1$ , za ktorú sa teleso

s energiou  $E_1 < 0$  už nemôže dostať. V prípade rozptylového stavu, v klasickej mechanike častejšie nazývanom infinitným pohybom, je celková energia  $E > 0$ , t. j. väčšia ako hodnota  $V(r)$  pre  $r \rightarrow \infty$ . Takéto teleso sa môže vzdialiť ľubovoľne ďaleko od silového centra.



Obr. 4.1

V kvantovej mechanike nemožno použiť predchádzajúcu argumentáciu bez zmeny, pretože pojem trajektórie sa nedá aplikovať na kvantovomechanický pohyb častíc. Napriek tomu i v kvantovej mechanike ostáva kvalitatívny rozdiel medzi viazanými a rozptylovými stavmi. Viazanými stavmi v kvantovej mechanike nazývame riešenia bezčasovej SchR (1), zodpovedajúce energii  $E < V(r \rightarrow \infty)$ , rozptylovými stavmi nazývame riešenia zodpovedajúce  $E > V(r \rightarrow \infty)$ .

Na základe analógie s klasickým prípadom očakávame, že stacionárny viazaný stav v určitom zmysle zodpovedá finitnému pohybu, preto pre takýto stav možno požadovať splnenie normovacej podmienky

$$\int \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} = 1 \quad (2)$$

ktorá hovorí, že pravdepodobnosť nájsť časticu kdekoľvek v priestore sa rovná jednej.

Viazané stavy okrem (definičnej) podmienky  $E < V(r \rightarrow \infty)$  spĺňajú i ďalšiu podmienku

$$E > \min V(r) \quad (3)$$

Energia viazaného stavu je teda vždy väčšia ako minimum potenciálnej energie. Tvrdenie dokážeme ľahko. Nech  $\psi(\mathbf{r}, t)$  je normované riešenie SchR

$$\left[ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(r) \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r})$$

Násobme túto rovnicu funkciou  $\psi^*(\mathbf{r})$  a integrujme cez celý priestor. Pri úprave prvého člena využijeme to, že  $\hat{p}$  je hermitovský operátor a dostaneme

$$\frac{1}{2m} \int \{ |p_x \psi|^2 + |p_y \psi|^2 + |p_z \psi|^2 \} d^3 \mathbf{r} + \int \psi^* V(\mathbf{r}) \psi d^3 \mathbf{r} = E$$

keď sme zobrali do úvahy normovanosť funkcie  $\psi$ . Prvý člen na ľavej strane je zrejme kladný, druhý je väčší ako minimum potenciálnej energie  $V(\mathbf{r})$ . Odtiaľ vyplýva vzťah (3).

Pri opise rozptylových stavov sa stretáme s obdobnými ťažkosťami ako v prípade vlnovej funkcie voľnej častice, ktorý sme diskutovali v článku 2.2. Aj tu môžeme postupovať dvoma spôsobmi. Pri prvom spôsobe sa obmedzíme na veľký, no konečný, objem priestoru a rozptylové stavy hľadáme ako superpozície rovinných vln, normovaných na konečný objem (2.2.5).

Pri druhom spôsobe pracujeme s nekonečným objemom, potom ale rozptylovým stavom zodpovedajú obvyklým spôsobom nenormovateľné vlnové funkcie. Znamená to, že takéto vlastné funkcie operátora energie nezodpovedajú realizovateľným stavom. Stacionárne rozptylové stavy nezodpovedajú teda možným stavom reálnej fyzikálnej sústavy. Napriek tomu je užitočné po formálnej stránke skúmať ich vlastnosti, pretože reálne rozptylové stavy (vlnové balíky) možno vyjadriť ako ich superpozície. Často možno pomocou jednoduchého formalizmu stacionárnych stavov nájsť intuitívnym spôsobom riešenie nejakého dynamického problému, ktorý by sme pri rigoróznom postupe museli riešiť pomerne komplikovane vo formalizme vlnových balíkov pomocou časovej Schrödingerovej rovnice. S takýmto prípadom sa stretneme v tejto kapitole pri diskusii o tunelovom jave a neskôr v teórii rozptylu.

### 4.3 NIEKTORÉ VLASTNOSTI RIEŠENÍ BEZČASOVEJ SCHRÖDINGEROVEJ ROVNICE

Potenciálna energia v reálne postavenej fyzikálnej úlohe je vždy spojitou funkciou priestorových súradníc. Často však pre zjednodušenie matematickej stránky úlohy je užitočné aproximovať potenciál nespojitou funkciou. Ako príklad možno uviesť potenciál jadrových síl, ktoré sú veľké v oblasti rádovo  $10^{-15}$  m, a potom rýchlo klesajú k nule. Na obr. 4.2 je znázornený schematický priebeh takejto potenciálnej energie (spojitá čiara) aj s nespojitou aproximáciou (prerušovaná čiara). Podobne možno v prvom priblížení považovať potenciálnu energiu elektrónu viazaného v kove za nespojitú. Pre elektrón vnútri kovu potenciálna energia má konštantnú hodnotu  $V_1$  a mimo kovu tiež konštantnú hodnotu  $V_2$ .

V tomto článku sa budeme zaoberať s nasledujúcimi otázkami:

- ako sa správa riešenie jednorozmernej bezčasovej SchR v okolí bodu, kde je potenciálna energia nespojitá?

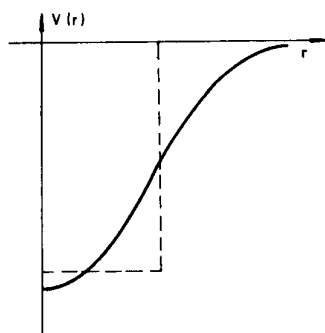
- ak  $\psi(x)$  je riešením jednorozmernej bezčasovej SchR, aké podmienky pre  $\psi(x)$  pri  $x \rightarrow \pm\infty$  vyplývajú z požiadavky

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (1)$$

- ak  $\psi(\mathbf{r})$  je riešením trojrozmernej bezčasovej SchR, aké podmienky pre správanie  $\psi(\mathbf{r})$  pri  $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$  a pri  $|\mathbf{r}| \rightarrow 0$  vyplývajú z požiadavky

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r} = 1 \quad (2)$$

(integrujeme cez celý priestor)?



Obr. 4.2

Začneme teda s tým, ako sa správa riešenie jednorozmernej bezčasovej SchR v okolí bodu, kde je potenciálna energia nespojitá.

Jednorozmernú bezčasovú SchR

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3)$$

možno prepísať na tvar

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]\psi(x) \quad (4)$$

Ak  $V(x)$  je spojitou funkciou, tak podľa rovnice (4) existuje pre každé  $x$  konečná druhá derivácia  $\psi''(x)$ . Preto  $\psi'(x)$  a  $V(x)$  budú spojité v každom bode skúmaného intervalu. Ak potenciál  $V(x)$  má nespojitosť v bode  $x_0$  (pozri bod *a* na obr. 4.3) potom by bolo potrebné presnejšie špecifikovať<sup>70</sup>) ako chápeme rovnicu (4) v bode

<sup>70</sup> Ak rovnicu (4) chápeme v zmysle zovšeobecnených funkcií a derivácií, potom dôkaz spojitosti  $\psi'(x)$  je jednoduchý. Ak by  $\psi'(x)$  mala v bode  $x_0$  nespojitosť, potom na ľavej strane rovnice (4) by bola singularita typu  $\delta$ -funkcie, kým pravá strana takúto singularitu nemá.

nespojivosti potenciálnej energie. Fyzikálne však máme na mysli zhruba toto: Potenciálnu energiu  $V(x)$  si predstavíme ako limitu postupností  $V_n(x)$  dostatočne hladkých funkcií a hľadajú funkciu  $\psi(x)$  ako limitu postupností riešení  $\psi_n(x)$  príslušných k jednotlivým  $V_n(x)$ . Naznačíme teraz, ako by sa postupovalo pri dôkaze toho, že  $\psi(x)$  je spojitá i so svojou prvou deriváciou v prípade, že  $V(x)$  je v okolí bodu  $x_0$  ohraničená a teda aj skok  $V(x)$  je konečný. Integráciou rovnice (4) dostaneme pre funkciu  $\psi_n(x)$

$$\psi'_n(x_0 + \varepsilon) - \psi'_n(x_0 - \varepsilon) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} [V(x) - E] \psi_n(x) dx \quad (5)$$

Ak  $\psi(x)$  je ohraničená, potom vo výraze (5) môžeme urobiť najprv limitu  $n \rightarrow \infty$ , potom limitu  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Na pravej strane dostaneme nulu, preto  $\psi'(x)$  musí byť v bode  $x_0$  spojitá. Tým skôr bude spojitá aj funkcia  $\psi(x)$ .

Uvedený argument neplatí, ak skok  $V(x)$  v bode  $x_0$  je nekonečne veľký. Vtedy  $\psi(x)$  v bode  $x_0$  nemusí byť spojitá, ale dá sa ukázať, že  $\psi(x)$  zostane spojitou.

Budeme preto vždy požadovať, aby pri nespojitom  $V(x)$  v prípade konečného „skoku“ v bode  $x_0$  bola spojitá samotná vlnová funkcia  $\psi(x)$  aj jej prvá derivácia  $\psi'(x)$ . Pri nekonečnom „skoku“ budeme žiadať len spojitost' vlnovej funkcie.

Podmienka normovateľnosti (1) kladie určité obmedzenia na správanie vlnovej funkcie v oblastiach  $x \rightarrow \infty$ ,  $x \rightarrow -\infty$ . Ak žiadame, aby integrál v rovnici (1) konvergoval, tak, ako sa možno ľahko presvedčiť,  $\psi(x)$  musí spĺňať podmienku

$$x|\psi(x)|^2 \rightarrow 0 \quad \text{pre} \quad |x| \rightarrow \pm\infty \quad (6)$$

V trojrozmernom prípade normovacia podmienka (2) vyžaduje

$$r^3|\psi(r)|^2 \rightarrow 0 \quad \text{pre} \quad |r| \rightarrow \infty \quad (7a)$$

$$r^3|\psi(r)|^2 \rightarrow 0 \quad \text{pre} \quad |r| \rightarrow 0 \quad (7b)$$

#### 4.4 JEDNOROZMERNÁ POTENCIÁLOVÁ JAMA

Budeme hľadať stacionárne stavy častice pohybujúcej sa v poli s potenciálnou energiou

$$V(x) \begin{cases} 0 & \text{pre } |x| > a \\ -V_0 < 0 & \text{pre } |x| \leq a \end{cases} \quad (1)$$

Ak sa zaujíname o viazané stavy, musíme riešiť SchR, ktorá má tvar

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

pričom hodnoty energie spĺňajú nerovnosti (článok 4.2)

$$E < V(x \rightarrow \pm\infty) = 0 \quad (3)$$

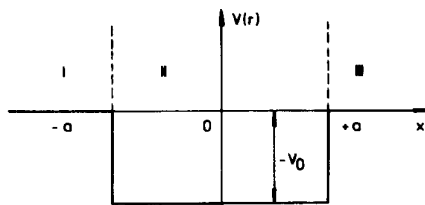
$$E > -V_0 = \min V(x) \quad (4)$$

Podľa článku 4.3 požadujeme pri riešení rovnice (2) s potenciálnou energiou (1) spojitosť  $\psi(x)$  a  $d\psi/dx$  v celom intervale  $(-\infty, +\infty)$ . Rozdeľme tento interval na tri časti:  $(-\infty, -a)$ ,  $(-a, a)$ ,  $(a, +\infty)$  a očísľujme ich postupne ako I, II a III. Intervaly spolu s tvarom  $V(x)$  sú vyznačené na obr. 4.3. V oblastiach I a III má SchR tvar

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \beta^2\psi(x) = 0, \quad \beta^2 = -\frac{2m}{\hbar^2}E > 0 \quad (5)$$

v oblasti II:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \alpha^2\psi(x) = 0, \quad \alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E) > 0 \quad (6)$$



Obr. 4.3

Riešenia týchto rovníc sú :

$$\psi_I(x) = De^{\beta x} + D'e^{-\beta x}$$

$$\psi_{II}(x) = A \sin \alpha x + B \cos \alpha x$$

$$\psi_{III}(x) = Ce^{-\beta x} + C'e^{\beta x} \quad (7)$$

Funkcia  $\psi_{III}(x)$  musí reprezentovať normovateľné riešenie SchR v oblasti  $(a, \infty)$ . Ak  $C' \neq 0$ , tak  $\psi_{III}(x) \rightarrow \infty$  pre  $x \rightarrow \infty$  a riešenie nemožno normovať (príslušný integrál by divergoval). Preto musíme žiadať, aby sa  $C' = 0$ . Z toho istého dôvodu  $D' = 0$ . Položme teda  $C' = D' = 0$ .

Z podmienok spojivosti vlnovej funkcie  $\psi(x)$  a jej prvej derivácie  $d\psi/dx$  v bodoch  $x = -a$  a  $x = a$  možno odvodiť dve dvojice rovníc

$$2A \sin \alpha a = (C - D)e^{-\beta a} \quad (8)$$

$$2\alpha A \cos \alpha a = -\beta(C - D)e^{-\beta a} \quad (8')$$

$$2B \cos \alpha a = (C + D)e^{-\beta a} \quad (9)$$

$$2\alpha B \sin \alpha a = \beta(C + D)e^{-\beta a} \quad (9')$$

Z posledných rovníc vidieť, že existujú dva typy riešení:

1. Keď  $A = 0$  a  $C = D$ . Rovnice (8) a (8') sú splnené identicky a rovnice (9) a (9') možno splniť len vtedy, ak platí:

$$a \operatorname{tg} \alpha a = \beta \quad (10)$$

2. Keď  $B = 0$  a  $C = -D$ ; rovnice (9) a (9') sú splnené identicky a rovnice (8) a (8') možno splniť len vtedy, ak platí:

$$a \operatorname{cotg} \alpha a = -\beta \quad (11)$$

Všimnime si najprv riešenie typu 1, t. j. pokúsme sa vyriešiť rovnicu (10). Ide zrejme o transcendentnú rovnicu, ktorá sa najjednoduchšie rieši graficky. Položme:

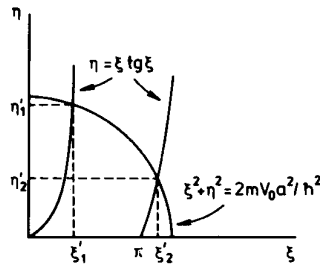
$$\xi = \alpha a, \quad \eta = \beta a \quad (12)$$

Z vyjadrení  $\alpha$  a  $\beta$  v rovniciach (5) a (6) vyplýva

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 \equiv R^2 \quad (12')$$

a z rovnice (10) dostaneme:

$$\xi \operatorname{tg} \xi = \eta \quad (13)$$



Obr. 4.4

Na obr. 4.4 sú znázornené krivky určené rovnicami (12') a (13). Sústava kriviek (13) je pevná a nezávisí od parametrov potenciálnej energie  $V_0$ ,  $a$ . Polomer kružnice (12') je daný parametrami potenciálnej energie

$$R^2 = \frac{V_0}{\frac{\hbar^2}{2ma^2}} \quad (14)$$

Každému priesečníku kružnice (12') so sústavou kriviek (14) odpovedá určité riešenie bezčasovej Schrödingerovej rovnice (2). V situácii znázornenej na obr. 4.4 máme dve riešenia typu 1, odpovedajúce priesečníkom  $(\xi'_1, \eta'_1)$ ,  $(\xi'_2, \eta'_2)$ . Diskrétnym hodnotám  $\eta_n$  odpovedajú podľa (5) a (12) diskkrétne hodnoty  $E_n$

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \eta_n^2 \quad (15)$$

Len pri týchto hodnotách energie má bezčasová Schrödingerova rovnica (2) riešenie. K diskrétnym hodnotám energie by sme prišli aj pri podrobnejšom overovaní riešení typu 2 (toto prenecháme čitateľovi).<sup>71</sup>

Pri pohľade na výsledky riešení typu 1 vznikajú hneď dve fyzikálne otázky: a) Prečo je mierou počtu viazaných stavov práve parameter  $R$ ? b) Prečo pri každej, teda aj krátkej (malé  $a$ ) a plytkej (malé  $V_0$ ) potenciálovej jame typu (1) existuje aspoň jeden viazaný stav? Začneme s prvou otázkou. Odpoveď na ňu je naznačená už tvarom, v ktorom sme zapísali  $R^2$  v (14). V čitateli máme veľkosť potenciálnej energie, v menovateli máme kinetickú energiu častice, ktorej vlnová funkcia má neurčitosť v polohe rovnú rádové rozmeru jamy. Skutočne, ak položíme  $\overline{x^2} \approx a^2$ , máme zo vzťahu neurčitosti  $\overline{p^2} \approx \overline{(p - \bar{p})^2} \approx (\Delta p)^2 \approx \hbar^2/a^2$  a príslušná kinetická energia sa rovná menovateli v (14).

Parameter  $R^2$  takto udáva pomer potenciálnej a kinetickej energie častice, ktorej vlnová funkcia je veľká práve v „jame“. Ak je  $R^2$  malé, potenciálová jama viaže časticu slabo, ak je  $R^2$  veľké, bude častica viazaná silnejšie a môže vzniknúť viac viazaných stavov.

Prejdime teraz ku kvalitatívnej odpovedi na otázku (b). Uvažujme vlnovú funkciu  $\psi(x)$ , ktorá je veľká v intervale  $(-L, L)$  a malá mimo neho. Vnútri tohto intervalu, vďaka podmienke normovania vlnovej funkcie, platí  $|\psi(x)|^2 \approx 1/(2L)$ . Stredná hodnota potenciálnej energie v takomto stave je

$$E_{\text{pot}}(L) \approx \int |\psi(x)|^2 V(x) dx \approx -V_0 \frac{a}{L} \quad \text{pre } L > a \quad (16)$$

$$\approx -V_0 \quad \text{pre } L \leq a$$

Stredná hodnota kinetickej energie bude podľa vzťahu neurčitosti

$$E_{\text{kin}}(L) \approx \frac{\hbar^2}{2mL^2}$$

<sup>71</sup> Podrobnejšiu analýzu viazaných stavov na potenciálovej jame (1) možno nájsť v učebnici Formánek J.: Úvod do kvantovej teórie, časť I, str. 67. SPN Praha 1973.



a pre celkovú energiu máme

$$E(L) \approx -V_0 \frac{a}{L} + \frac{\hbar^2}{2mL^2} \quad \text{pre } L > a \quad (17a)$$

$$\approx -V_0 \frac{a}{L} + \frac{\hbar^2}{2mL^2} \quad \text{pre } L \leq a \quad (17b)$$

Pre dostatočne veľké  $L$  je pravá strana v (17a) záporná a pre dostatočne malé  $L$  je pravá strana v (17b) určite kladná. Funkcia  $E(L)$  má preto minimum pri nejakej hodnote  $L = L_0$  a pri tomto minime je  $E(L_0) < 0$ .

Pravá strana (17a) má minimum pri

$$L = L_0 = \frac{\hbar^2}{mV_0 a} = \frac{2}{R} a$$

a ľahko sa presvedčíme o tom, že pri malom  $R$  je to skutočné minimum funkcie  $E(L)$ . Príslušná hodnota energie pri  $L = L_0$  je

$$E(L_0) = -R^2 V_0 \quad (18)$$

kde  $R^2$  je dané vzťahom (14). Tento výsledok je teda kvalitatívnym a rádovým odhadom energie základného stavu pre jednorozmernú potenciálovú jamu.

Porovnajme teraz kvalitatívny odhad (18) s tým, čo by sme dostali z presného riešenia pri  $R \ll 1$ . Pre toto presné riešenie platia rovnice (12') a (13). Z (12') a z obr. 4.4 vidno, že pri malom  $R$  budú aj  $\xi$ ,  $\eta$  malé. Pre  $\xi \ll 1$  platí  $\text{tg } \xi \approx \xi$  a namiesto (13) máme  $\eta \approx \xi^2$ . Ak toto dosadíme do (12'), dostaneme  $\xi^2 + \xi^4 = R^2$ . Pri malom  $\xi$  odtiaľ plynie  $\xi^2 \approx \eta \approx R^2$  a po dosadení do (15) nájdeme pre základný stav

$$E_1 \approx -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \eta^2 = -\frac{\hbar^2}{ma^2} R^4$$

Po malej úprave obdržíme

$$E_1 = -V_0 R^2$$

Čo je identické so vzťahom (18), získaným kvalitatívnym odhadom.

Kvalitatívna analýza jasne ukazuje, prečo vzniká viazaný stav aj na plytkej a krátkej jame. Ak postupne zväčšujeme rozmer  $L$  vlnovej funkcie  $\psi(x)$ , potom stredná hodnota potenciálnej energie (prvý člen na pravej strane (17a)) klesá ako  $L^{-1}$  zatiaľ čo kinetická energia klesá ako  $L^{-2}$ . Pri istej hodnote  $L$  musí byť celková energia záporná. Tieto skutočnosti vyplývajú zo vzťahu neurčitosti a pravdepodobnostnej interpretácie vlnovej funkcie.

Všimnime si, že riešenia typu 1 spĺňajú podmienku  $\psi(x) = \psi(-x)$  a riešenia typu 2 podmienku  $\psi(x) = -\psi(-x)$ . V prvom prípade hovoríme o riešeniach

s kladnou, v druhom so zápornou priestorovou paritou. Existencia riešení s určitou paritou je dôsledkom symetrie potenciálnej energie  $V(x)$ , pre ktorú platí  $V(x) = V(-x)$ . S otázkami symetrie riešení SchR sa budeme ešte zaoberať ďalej.

*Typické rozdiely medzi kvantovou a klasickou mechanikou pri opise viazaných stavov.* Podľa zákonov klasickej mechaniky by sa častica s energiou  $E < 0$  nemohla dostať von z potenciálovej jamy na obr. 4.3. V kvantovej mechanike pravdepodobnosť výskytu častice aj v týchto „klasicky zakázaných“ oblastiach je konečná. „Presakovanie“ do oblasti, kde  $V(x) > E$ , je typickým kvantovomechanickým javom a má mnohé vážne dôsledky (tunelový jav). V uvažovanom prípade potenciálovej jamy vlnová funkcia v oblasti  $|x| > a$  klesá exponenciálne k nule:

$$\psi(x) \sim e^{-\beta|x|}, \quad \beta = (-2mE/\hbar^2)^{1/2} \quad (19)$$

Celkom analogickým postupom sa možno presvedčiť o tom, že pre potenciál

$$\nabla(x) = 0 \quad \text{pre } |x| < a \quad (20)$$

$$\nabla(x) = V_0 \quad \text{pre } |x| > a$$

sa v oblasti  $|x| > a$  budú riešenia správať ako

$$\psi(x) \sim e^{-\gamma|x|}, \quad \gamma = [2m(V_0 - E)/\hbar^2]^{1/2} \quad (21)$$

## Mechanizmus kvantovania

Po matematickej stránke je jednorozmerná jama naozaj jednoduchý problém, ale aj tu by sa mohlo stať, že matematika trochu zatemní základný mechanizmus, ktorým prichádzame k diskretným stacionárnym stavom a tým i ku kvantovaniu energie. Pozrime sa na tento problém ešte raz a predstavme si, že sme ho skúsili riešiť veľmi hlúpu metódou na počítači (aj hlúpe metódy môžu byť poučné). Metóda by spočívala v nasledujúcom. Zvolili by sme si určitú hodnotu energie  $E$  z intervalu  $-V_0 < E < 0$  a spočítali by sme podľa (5) príslušnú hodnotu parametra  $\beta$ . Teraz by sme sa pozreli na tvar riešenie v oblasti I, daný vzťahom (7) a položili by sme  $D' = 0$ , aby sme v oblasti I, t. j. pre  $x < -a$  mali normovateľnú vlnovú funkciu. Takto by sme v oblasti I mali riešenie

$$\psi_I(x) \sim D e^{\beta x} \quad (22)$$

a pre začiatok by sme mohli položiť  $D = 1$  s tým, že po skončení výpočtu by sme celú funkciu násobili ešte konštantnou vybranou tak, aby riešenie  $\psi(x)$  bolo správne normované. S týmto riešením by sme postupovali od  $x$  ďaleko naľavo na číselnej osi smerom k bodu  $x = -a$ . Tam by sme riešenie (22) „zošli“ s oscilujúcim riešením

$$\psi_{II}(x) = A \sin \alpha x + B \cos \alpha x \quad (23)$$

pričom zo spojitosti  $\psi(x)$ ,  $\psi'(x)$  v bode  $x = -a$  by sme určili hodnoty  $A$ ,  $B$  (parameter  $a$  je daný vzťahom (6)). Počítač by postupoval ďalej doprava, až by prišiel k bode  $x = a$ , kde by zas „zošil“ (23) s výrazom typu

$$\psi_{III}(x) = Ce^{-\beta x} + C'e^{\beta x} \quad (24)$$

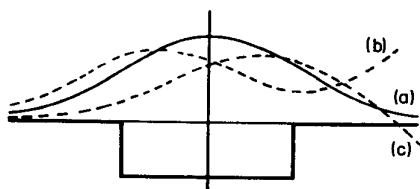
Podstatné je tu to, že parametre  $C$ ,  $C'$  závisia (pri  $D = 1$ ) iba od energie a sú jednoznačne určené „zošívacími“ podmienkami. Pri náhodne zvolenom  $E$ , s ktorým počítame, je nanajvyš pravdepodobné, že dostaneme  $C \neq 0$ ,  $C' \neq 0$ , ale to znamená, že získané riešenie nie je možné normovať, lebo časť  $C' \exp(\beta x)$  v (24) exponenciálne „vybuchuje“ pre  $x \rightarrow \infty$ . Postupne by sme mohli vybrať iné hodnoty  $E$ , zopakovať celý postup znova a dúfať, že niekedy „trafíme“ do správnej hodnoty  $E$ , pri ktorej bude  $C' = 0$ , a dostaneme normovateľné riešenie bezčasovej SchR.

Dva neúspešné (b, c) a jeden úspešný pokus (a) sú znázornené na obr. 4.5. Vidno teda, že výber stacionárnych stavov je daný sčasti samotnou Schrödingerovou rovnicou a sčasti podmienkami

$$\psi(x) \rightarrow 0 \quad \text{pre } x \rightarrow -\infty \quad (25)$$

$$\psi(x) \rightarrow 0 \quad \text{pre } x \rightarrow +\infty$$

ktoré zaisťujú normovateľnosť funkcie. Keby sme nepožadovali splnenie (25), mala by bezčasová Schrödingerova rovnica (2) riešenie pri ľubovoľnej hodnote parametru  $E$ . Takéto riešenia by však určite nezodpovedali častici viazanej vnútri jamy, čo vidno najjednoduchšie z toho, ak si nakreslíme hustotu pravdepodobnosti  $|\psi(x)|^2$  pre riešenie odpovedajúce (b), (c) na obr. 4.5. Navyše, z takýchto riešení sa ani superpozíciou nedá vytvoriť normovateľný vlnový balík, čím sa odlišujú napríklad od riešení zodpovedajúcich rozptylovým stavom, ktoré samotné tiež nie sú normovateľné, ale superpozíciou môžu vytvoriť realistický vlnový balík.



Obr. 4.5

Príklady, s ktorými sa stretne v nasledujúcich článkoch, sú síce zložitejšie, ale túto vlastnosť majú spoločnú s jednorozmernou jamou. V prípade jamy existovali dva „nebezpečné body“<sup>72</sup> a síce  $x \rightarrow \infty$ ,  $x \rightarrow -\infty$ . Nebezpečné boli preto,

<sup>72</sup> V ďalších článkoch sa „nebezpečné“ body nazývajú singulárnymi bodmi.

že v ich okolí existuje jedno „dobré“ riešenie typu  $\exp\{-\beta|x|\}$  a jedno „zlé“ riešenie typu  $\exp\{\beta|x|\}$ . Ak má mať výsledná funkcia  $\psi(x)$  fyzikálny zmysel, potom koeficienty pred zlým riešením v oboch „nebezpečných“ bodoch musia byť nulové. Tieto podmienky sú práve tým, čo vyberá len diskretnú množinu stacionárnych stavov, teda tým, čo „kvantuje“ energiu.

## 4.5 NEKONEČNE HLBOKÁ POTENCIÁLOVÁ JAMA

V tejto učebnici sme sa už dvakrát zaoberali s prípadom častice v nekonečne hlbkej potenciálovej jame, prvýkrát pri kvalitatívnej diskusii stacionárnych stavov v kap. 1 a druhýkrát v článku 2.6. V článku 2.6 sme riešili bezčasovú SchR pre voľnú časticu na intervale  $0 \leq x \leq L$  a ako okrajové podmienky pre riešenia sme žiadali  $\psi(x) = \psi(L) = 0$ . Teraz nebudeme tento príklad riešiť znova, ale všimneme si iba pôvod týchto okrajových podmienok.

Nekonečne hlbokú potenciálovú jamu môžeme chápať ako užitočné priblíženie pre energie a vlnové funkcie stacionárnych stavov nachádzajúcich sa „blízko dna“ jamy. Presnejšie to môžeme sformulovať takto. Predstavme si časticu pohybujúcu sa po priamke v poli síl opísaných potenciálnou energiou

$$V(x) = V_0 \quad \text{pre } x < 0 \quad (\text{I})$$

$$V(x) = 0 \quad \text{pre } 0 \leq x \leq L \quad (\text{II})$$

$$V(x) = V_0 \quad \text{pre } x > L \quad (\text{III})$$

Podobne ako v predchádzajúcom článku sa ľahko presvedčíme o tom, že vlnové funkcie stacionárnych stavov v oblasti (I) a (III) majú tvar

$$\psi_{\text{I}}(x) = D \exp\{-\beta|x|\}$$

$$\psi_{\text{III}}(x) = C \exp\{-\beta|x|\}$$

kde

$$\beta = \left[ \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \right]^{1/2}$$

Ak  $V_0$  je veľmi veľké, potom  $\psi_{\text{I}}(x)$  a  $\psi_{\text{III}}(x)$  veľmi rýchlo klesajú s tým, ako sa vzdľahujeme od jamy. V limite  $V_0 \rightarrow \infty$  prichádzame k situácii, keď

$$\psi(x) \rightarrow 0 \quad \text{pre } x \text{ mimo jamy}$$

Z hľadiska pohybu častice vnútri jamy to ale znamená, že

$$\psi_{\text{I}}(x) \rightarrow 0 \quad \psi_{\text{III}}(L) \rightarrow 0$$

a toto sú okrajové podmienky, ktoré sme používali v článku 2.6.

Nie je prekvapujúce, že tieto podmienky vedú ku kvantovaniu energie, lebo sú to vlastne dôsledky okrajových podmienok, ktoré sme používali v prípade konečnej jamy, po limite  $V_0 \rightarrow \infty$ .

Vlastné hodnoty operátora energie a vlnové funkcie príslušné k týmto hodnotám boli už uvedené v článku 2.6 a tu ich nebudeme opakovať.

## 4.6 LINEÁRNY HARMONICKÝ OSCILÁTOR

Matematický opis lineárneho harmonického oscilátora je pomerne jednoduchý a oblasť aplikácií neobyčajne široká. Pri lineárnom harmonickom oscilátore je sila  $F$  priamo úmerná výchylke  $x$  a má opačný smer. Platí  $F = -kx$ . Pretože  $F = -dV/dx$ , potenciálna energia  $V(x)$  je daná výrazom  $V(x) = kx^2/2$ . Konštantu  $k$  je užitočné zapísať v tvare  $m\omega_0^2$ , kde  $m$  je hmotnosť a  $\omega_0$  je (vlastná) kruhová frekvencia oscilátora. Ak takéto  $V(x)$  dosadíme do bezčasovej SchR, dostaneme

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{m\omega_0^2}{2} x^2 \psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

Pretože  $\min V(x) = 0$ , rovnica (1) bude mať len riešenia s  $E > 0$ . Pre  $x \rightarrow +\infty$  platí  $V(x) \rightarrow \infty$  a všetky riešenia (1) budú mať charakter viazaných stavov. Preto budeme v ďalšom považovať za fyzikálne prijateľné len normovateľné riešenia, ktoré zrejme musia spĺňať podmienku

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \psi(x) = 0 \quad (2)$$

Namiesto premennej  $x$  je užitočné zaviesť bezrozmernú premennú

$$\xi = \frac{x}{x_0} \quad x_0 = \left[ \frac{\hbar}{m\omega_0} \right]^{1/2}$$

v ktorej (1) nadobudne tvar

$$\psi''(\xi) + (\lambda - \xi^2) \psi(\xi) = 0 \quad \lambda = 2E/(\hbar\omega_0) \quad (4)$$

Diferenciálna rovnica (4) patrí k typu, ktorý sa často vyskytuje v úlohách matematickej fyziky. Ide o lineárnu homogénnu diferenciálnu rovnicu druhého rádu s premennými koeficientmi.

Pre rovnice tohto typu existuje postup riešenia, spočívajúci v podstate v tom, že najprv hľadáme tvar riešení v okolí *singulárnych bodov*.<sup>73</sup> Túto časť riešenia možno

<sup>73</sup> Tento postup je len o trochu komplikovanejší ako ten, ktorý sme používali v predchádzajúcom článku. Singulárne body sú „nebezpečné body“, teda také, v okolí ktorých môžeme dostať nenormovateľné tvary riešenia. Ako bude vidno hneď v rovnici (6), aj tu existujú v okolí sing. bodov dva typy riešení a podmienka normovateľnosti vyžaduje, aby koeficient pri „zlom“ riešení bol nulový ( $c_2 = 0$ ).

oddeliť v multiplikatívnom tvare a zvyšnú časť riešenia hľadáme v tvare mocninnového radu premennej  $x$  (alebo  $(x - a)$ , kde  $a$  je vhodne zvolená konštanta). Koeficienty pri jednotlivých mocninách daného mocninnového radu určíme priamo z diferenciálnej rovnice. Skúmame najprv riešenie rovnice (4) pre veľké  $\xi$ . Nebudeme hľadať presné riešenie, ale len asymptotické riešenie. Pri tomto riešení sa zaujímate len o hlavný člen skutočného riešenia, čiže napr. v okolí bodu  $\xi = \infty$  zanedbáme  $1/\xi$  voči 1,  $\xi$  voči  $\xi^2$  a pod. V tomto zmysle môžeme pre veľké  $\xi$  zanedbať A voči  $\xi^2$  a prepísať rovnicu (4) na tvar

$$\psi''(\xi) - \xi^2 \psi(\xi) = 0 \quad (5)$$

Asymptotickým riešením rovnice (5) je funkcia

$$\psi(\xi) = c_1 e^{-\xi^2/2} + c_2 e^{+\xi^2/2} \quad (6)$$

Skutočne, po dosadení do (5) dostaneme

$$\psi''(\xi) = \xi^2(c_1 e^{-\xi^2/2} + c_2 e^{+\xi^2/2}) + (c_2 e^{+\xi^2/2} - c_1 e^{-\xi^2/2}) \quad (7)$$

Druhý člen vpravo je pre veľké  $\xi$  zanedbateľný v predtým uvedenom zmysle voči prvému, a tak (6) je asymptotickým riešením rovnice (5). V dôsledku (2) musíme v rovnici (6) položiť  $c_2 = 0$ . Podľa naznačenej schémy riešenia oddelíme asymptotické riešenie  $\exp(-\xi^2/2)$  a hľadáme (tentokrát už presné) riešenie rovnice (4) v tvare

$$\psi(\xi) = v(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad v(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n$$

Po dosadení (8) do (4) dostaneme pre  $v(\xi)$  diferenciálnu rovnicu

$$v''(\xi) - 2\xi v'(\xi) + (\lambda - 1) v(\xi) = 0 \quad (9)$$

Ak teraz dosadíme rozvoj pre  $v(\xi)$  do rovnice (9) a porovnáme koeficienty pri jednotlivých mocninách  $\xi$ , dostaneme rekurentný vzťah

$$a_{n+2} = \frac{2n+1-\lambda}{(n+1)(n+2)} a_n \quad (10)$$

Podľa (10) rad pre  $v(\xi)$  môže patriť do jedného z troch (a len týchto) typov:

1.  $a_0 \neq 0$ ,  $a_1 = 0$ ,  $\lambda = 2k + 1$ ,  $k$  je prirodzené a párne. V tomto prípade  $v(\xi)$  je polynóm stupňa  $k$ , obsahujúci len párne mocniny  $\xi$ .

2.  $a_0 = 0$ ,  $a_1 \neq 0$ ,  $\lambda = 2k + 1$ ,  $k$  je prirodzené a nepárne,  $v(\xi)$  je opäť polynóm stupňa  $k$ , ktorý obsahuje len nepárne mocniny  $\xi$ .

3. Rad pre  $v(\xi)$  obsahuje nekonečne mnoho nenulových koeficientov  $a_n$ . Na konci tejto časti ukážeme, že riešenia takéhoto typu sú neprípustné, lebo nespĺňajú normovacia podmienku.

Všimnime si bližšie hodnoty energie, ktoré zodpovedajú fyzikálne prípustným riešeniam 1. a 2. typu. V oboch prípadoch platí:

$$\lambda = 2k + 1, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Podľa (4) dostaneme odtiaľ prípustné hodnoty energie pre lineárny harmonický oscilátor

$$E_k = \hbar\omega \left( k + \frac{1}{2} \right), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (11)$$

Vlnové funkcie príslušné k týmto hodnotám energie môžeme priamo skonštruovať z rovnice (8) a z rekurentných vzťahov (10). Tieto riešenia majú tvar

$$\psi_k(\xi) = N_k H_k(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

kde  $H_k(\xi)$  sú polynómy  $k$ -teho stupňa, pri párnom  $k$  obsahujú  $H_k$  iba párne mocniny  $\xi$  a pri nepárnom  $k$  iba nepárne mocniny. Konštanta  $N_k$  v (12) je určená normovacou podmienkou

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_k(x)|^2 dx = 1 \quad (13)$$

Napríklad pre riešenie odpovedajúce základnému stavu ( $k = 0$ ) zvolme  $a_0 = 1$ . Je to riešenie typu 1, teda  $a_1 = 0$  a z rekurentného vzťahu (10) potom dostaneme  $a_i = 0$  pre  $i \geq 2$ . Vlnová funkcia základného stavu má teda tvar

$$\psi_0(\xi) = C' \cdot \xi \cdot e^{-\xi^2/2}$$

kde  $C'$  je normalizačná konštanta.

Prvému excitovanému stavu ( $k = 1$ ) odpovedá riešenie typu 2,  $a_0 = 0$ ,  $a_1 = 1$  (napríklad),  $a_i = 0$  pre  $i \geq 2$  a dostaneme

$$\psi_1(\xi) = C' \cdot \xi \cdot e^{-\xi^2/2}$$

kde  $C'$  je opäť normalizačná konštanta.

Lahko možno ukázať, že (pri vhodnej voľbe normovania) polynómy  $H_k(\xi)$  sú totožné s *Hermitovými polynómami*, ktorých vlastností sú v matematike dobre známe; najzákladnejšia informácia o nich je uvedená v dodatku A2. S využitím vzťahu (A2.4) by sme mohli určiť i všeobecný tvar normovacej konštanty  $N_k$  a dostali by sme

$$\psi_k(x) = \left( \frac{m\omega_0}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^k k!}} H_k(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

kde  $\xi = x \sqrt{\frac{m\omega_0}{\pi}}$ .

Pravda, normovacou podmienkou (13) je konštanta  $N_k$  určená až na fázový faktor typu  $e^{i\alpha}$ . Takýto faktor nemá fyzikálny význam, naša konvencia (14) odpovedá  $N_k$  reálnemu kladnému.

Vráťme sa teraz naspäť k riešeniam 3. typu. Ako sme už spomínali, tieto riešenia treba zamietnuť, pretože nespĺňajú normovaciu podmienku. Ak totiž rad pre  $v(\xi)$  má nekonečný počet členov, tak  $v(\xi) \rightarrow \exp(\xi^2)$  pre  $\xi \rightarrow \infty$  a funkcia  $\psi(\xi)$  určená rovnicou (8) sa zrejme nedá normovať. Bez podrobného dôkazu uvedieme len jednoduchý argument, ktorý robí tvrdenie prijateľným. Taylorov rozvoj funkcie  $\exp(\xi^2)$  je:

$$e^{-\xi^2/2} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (\xi^2)^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\xi^{2k}}{k!} = \sum_{\substack{k=0 \\ k \text{ párne}}}^{\infty} b_k \xi^k$$

kde  $b_k = 1/(k/2)!$

Pre veľké  $k$  platí

$$\frac{b_{k+2}}{b_k} \rightarrow \frac{2}{k}$$

a to je ten istý pomer, aký majú pre veľké  $k$  koeficienty rozvoja  $v(\xi)$  (pozri rovnicu (10)).

#### 4.7 TUNELOVÝ JAV. PRECHOD ČASTICE CEZ BARIÉRU

V článku 4.4 sme už videli, že pri pohybe v jednorozmernej jame v oblasti, kde je potenciálna energia  $V$  väčšia ako celková energia častice, vlnová funkcia klesá exponenciálne ako  $\exp\{-\gamma |x|\}$ ,  $\gamma^2 = (2m/\hbar^2)(V - E)$ . Takto, v istom zmysle častica „presakuje“ do oblasti, ktorá je pre ňu podľa klasickej mechaniky zakázaná. Toto „presakovanie“ má viaceré významné dôsledky. Ukazuje sa totiž, že častica dopadajúca na potenciálovú bariéru vyššiu ako je energia častice, môže touto bariérou s istou pravdepodobnosťou prejsť.

Teraz si ukážeme na veľmi jednoduchom príklade ako k tomu dochádza.

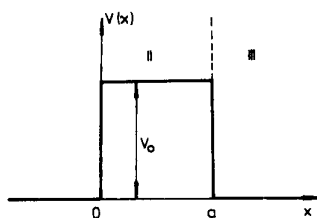
Sledujme pohyb častice v poli potenciálnej energie  $V(x)$ , znázornenej na obr. 4.6.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pre } x < 0, \quad x > a \\ V_0 > 0 & \text{pre } 0 \leq x \leq a \end{cases} \quad (1)$$

Budeme sa zaujímať o takúto fyzikálnu situáciu: Nech zľava smerom k bariére sa pohybuje častica s energiou  $0 < E < V_0$ . V klasickej mechanike by sa takáto častica musela po náraze na bariéru odraziť naspäť. V kvantovej mechanike však



s nenulovou pravdepodobnosťou prejde bariérou a bude sa pohybovať (opäť s energiou  $E$ ) v oblasti III (obr. 4.6) smerom od bariéry. Našou úlohou je nájsť príslušnú pravdepodobnosť prechodu.



Obr. 4.6

Už podľa formulácie úlohy vidno, že ide o dynamický nestacionárny problém, ktorý by sme mali riešiť pomocou časovej SchR. Postup by bol nasledovný. Zvolili by sme v nejakom čase  $t_0$  vhodnú vlnovú funkciu (normovaný vlnový balík) reprezentujúci časticu dostatočne lokalizovanú v oblasti I, pohybujúcu sa smerom k bariére. Potom by sme riešili časovú SchR s takouto vlnovou funkciou ako začiatočnou podmienkou. Získali by sme tak tvar vlnovej funkcie v (dostatočne) neskoršom čase  $t$  a vypočítali by sme pomocou tejto vlnovej funkcie pravdepodobnosť nájsť v čase  $t$  časticu v oblasti III (za bariérou).

Opísaný postup je pomerne komplikovaný, možno však dúfať, že už preskúmanie stacionárneho problému – t. j. bezčasovej SchR – naznačí správnu odpoveď. Realistický vlnový balík totiž možno vyjadriť ako superpozíciu stacionárnych vlnových funkcií. Pri skúmaní sa stačí obmedziť na také stacionárne riešenia, o ktorých je možné očakávať, že v spomínanej superpozícii budú vystupovať. Kvalitatívne možno ľahko „uhádnuť“, aké riešenia to asi budú. Z tvaru potenciálnej energie  $V(x)$  vidno, že v oblastiach ďaleko od bariéry budú mať riešenia tvar riešení pre voľnú časticu – budú to teda rovinné vlny. (Z charakteru  $V(x)$  je zrejmé, že ide o rozptyľové stavy.) Z fyzikálneho hľadiska je zrejmé, že v superpozícii vytvárajúcej hľadaný vlnový balík budú vystupovať len také stacionárne riešenia, ktoré v oblasti III (obr. 4.6) budú mať charakter rovinných vln šíriacich sa v smere kladnej osi  $x$  – teda v smere od bariéry. Intuitívne je totiž zrejmé, že v relevantných riešeniach nevystupuje nič, čo má charakter vln dopadajúcich na bariéru sprava.

Budeme sa zaujímať o riešenia odpovedajúce energii  $E$  z intervalu  $0 < E < V_0$  (pre takéto hodnoty energie totiž klasická častica nemôže bariérou prejsť). Riešenia bezčasovej SchR

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

majú potom v intervaloch I, II a III nasledujúci tvar

$$\begin{aligned}\psi_{\text{I}}(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & k &= p/\hbar = [2mE/\hbar]^{1/2} \\ \psi_{\text{II}}(x) &= Fe^{-\alpha x} + Ge^{\alpha x}, & \alpha &= [2m(V_0 - E)/\hbar]^{1/2} \\ \psi_{\text{III}}(x) &= Ce^{ikx} + De^{-ikx}\end{aligned}\quad (3)$$

Ostáva urobiť štandardnú procedúru – „zošit“ riešenia na hraniciach oblastí I, II a III. Pripomeňme si však, že náš problém nie je nájsť všetky riešenia rovnice (2), ale len také riešenia, ktoré majú v oblasti III charakter vlny šíriacej sa v smere od bariéry. Vo vyjadrení  $\psi_{\text{III}}$  vo vzťahu (3) tieto vlny zodpovedajú členu  $Ce^{ikx}$  kým člen  $De^{-ikx}$  reprezentuje vlny dopadajúce na bariéru sprava. Táto interpretácia je zrejme totiž už z porovnania s tvarom de Broglieho rovinných vln pre voľné častice (2.2.1). Vlna typu  $e^{ikx}$  zodpovedá častici s priemetom hybnosti na os  $x$  rovným  $+\hbar k$ , vlna typu  $e^{-ikx}$  zodpovedá priemetu hybnosti  $-\hbar k$ , a teda častici pohybujúcej sa sprava doľava.

Pre našu úlohu sú teda relevantné iba také riešenia, ktoré majú v oblasti III tvar

$$\psi_{\text{III}}(x) = Ce^{ikx} \quad (4)$$

teda pre ktoré  $D = 0$ . Môžeme očakávať, že riešenia, ktoré majú takýto tvar, by vhodnou superpozíciou vytvorili vlnu s charakterom vlnového balíka, zodpovedajúceho formulácii našej úlohy.

Koeficient  $C$  nechajme zadal ľubovoľný. Z požiadavky spojitosti riešenia a jeho prvej derivácie v bodoch  $x = 0$  a  $x = a$  potom ľahko dostaneme pre koeficienty  $A, B, F, G$  podmienky

$$A + B = F + G, \quad Fe^{-\alpha a} + Ge^{\alpha a} = Ce^{ika} \quad (5)$$

$$ik(A - B) = \alpha(G - F), \quad Ge^{\alpha a} - Fe^{-\alpha a} = ikCe^{ika} \quad (5a)$$

Z rovníc (5) už možno ľahko vyjadriť štyri z koeficientov  $A, B, C, F, G$  pomocou jedného z nich, napríklad pomocou  $A$ , ktorý bude vystupovať ako multiplikatívny faktor. Schr je lineárna homogénna rovnica, preto takýto ľubovoľný multiplikatívny parameter v riešení je prirodzený. Na jeho určenie nemôžeme využiť normovaciu podmienku, ako je to obvyklé v prípade viazaných stavov. Naše riešenie má charakter rozptylového stavu. Preto, ako sme už viackrát hovorili, sa nedá normovať obvyklým spôsobom.

Teraz by sme sa mohli pokúsiť pomocou nájdených riešení skonštruovať vlnový balík zodpovedajúci zadaniu úlohy a nájsť hľadanú pravdepodobnosť prechodu. S trochou intuície však odpoveď už vidno priamo z charakteru nájdených stacionárnych riešení. V spomínanej superpozícii by totiž zrejme členy typu  $Ae^{ikx}$  prispievali do balíka reprezentujúceho dopadajúcu časticu, členy typu  $Ce^{ikx}$  časticu prejdenu bariérou. Členy typu  $Be^{-ikx}$  ktoré majú charakter vlny šíriacej sa

oblasti I v smere zápornej osi  $x$ , budú prispievať do balíka reprezentujúceho časticu odrazenú od bariéry.

O tejto interpretácii svedčí aj výraz pre hustotu prúdu pravdepodobnosti. Ak  $\psi_1(x)$  dané rovnicou (3) dosadíme do (3.2.4) dostaneme

$$j_x = \frac{p}{m} (|A|^2 - |B|^2) \quad \frac{p}{m} = v$$

kde  $v$  je rýchlosť častice.

Možno teda očakávať, že v zmysle pravdepodobnostnej interpretácie vlnovej funkcie veličiny

$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2}, \quad R = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

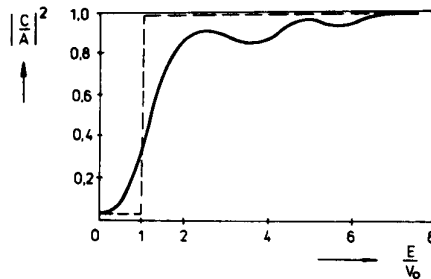
budú mať význam pravdepodobnosti prechodu resp. pravdepodobnosti odrazu častice od bariéry. Po dosadení výrazov pre  $C$  a  $B$  získaných z rovníc (5), dostaneme

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2 \sinh^2 \alpha a}{4E(V_0 - E)}}, \quad R = 1 - T \quad (6)$$

Podobne možno vypočítať aj koeficient prechodu a odrazu pre  $E > V_0$ . Výsledok je (pozri napr. [8])

$$T = \left[ 1 + \frac{V_0^2 \sinh^2 \beta a}{4E(V_0 - E)} \right]^{-1}, \quad \beta = [2m(V_0 - E)/\hbar^2]^{1/2} \quad (7)$$

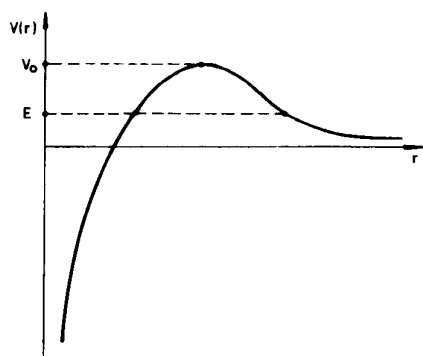
Závislosť koeficientu  $T$  od pomeru  $E/V_0$  je na obr. 4.7, kde sme prerušovanou čiarou naznačili aj koeficient prechodu častice pódia klasickej mechaniky.



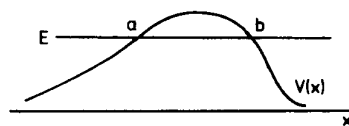
Obr.4.7

Vidíme, že podľa nej v prípade, ak  $E < V_0$ , častica nemôže preniknúť cez bariéru, v prípade  $E > V_0$  prenikne vždy. Dôležitý je najmä priebeh kvantovomechanickej krivky pre  $E < V_0$ . Pretože klasická častica sa v tomto prípade nemôže dostať cez bariéru, dá sa obrazne povedať, že podľa kvantovej mechaniky existujú akési „tunely“, ktorými častica predsa len prenikne. Preto sa jav nazýva tunelovým javom.

Prvýkrát tento efekt použil G. Gamow na objasnenie energetických spektier a pravdepodobností  $\alpha$  rozpadu jadier. Častica  $\alpha$  je pomerne stabilný útvar a možno sa domnievať, že v istom zmysle existuje v jadre už predtým, než z neho pri rozpade vyletí. Existujú isté odhady potenciálu, ktorým pôsobí jadro na  $\alpha$  časticu. Znázorníme schematicky tento potenciál ako funkciu vzdialenosti  $r$  od stredu jadra na obr. 4.8. Energie častíc  $\alpha$  opúšťajúcich jadro, boli však často značne menšie ako maximum  $V(r)$ , označené  $V_0$ . Z klasického hľadiska nebolo možné efekt vysvetliť. Gamow v roku 1928 ukázal, že podľa kvantovej mechaniky častice môžu preniknúť cez potenciálovú bariéru a kvalitatívne vysvetlil energetické spektrum častíc  $\alpha$  pri rozpade jadier.



Obr. 4.8



Obr. 4.9

Tunelový efekt sa prejavuje často aj v polovodičoch, kde môžu na styku dvoch materiálov vznikáť komplikované potenciálové bariéry. Podrobnosti nebudeme rozoberať, spomenieme len názov „tunelová dióda“, ktorý už sám poukazuje na súvislosť s tunelovým javom.

V predchádzajúcom sme skúmali podrobne prechod častice cez potenciálovú bariéru toho najjednoduchšieho typu. Uvedme teraz ešte len veľmi intuitívny argument pre správanie sa vlnovej funkcie pod bariérou vo všeobecnejšom prípade bariéry komplikovanejšieho tvaru.

Kvôli tomu sa vrátíme k diskusii článku 4.4 a pripomenieme si, že pre časticu v oblasti s  $E < V$  vlnová funkcia klesá ako

$$\exp\left\{-\left[\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\right]^{1/2} x\right\}$$

Na úseku dlhom  $\Delta x$  sa takto amplitúda vlnovej funkcie zmenší o

$$\exp\left\{-\left[\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\right]^{1/2} \Delta x\right\}$$

Toto platí iba pri konštantnom potenciáli. Ak sa ale potenciál mení veľmi pomaly (ale stále platí  $E < V_0$ ), potom očakávanie, že s rastúcim  $x$  by vlnová funkcia klesala takto

$$\exp\left\{-\left[\frac{2m}{\hbar^2}(V(x_1) - E)\right]^{1/2} \Delta x_1\right\} \exp\left\{-\left[\frac{2m}{\hbar^2}(V(x_2) - E)\right]^{1/2} \Delta x_2\right\} \dots \quad (8)$$

kde  $x_1, x_2, \dots$ , sú body v strede intervalov  $\Delta x_1, \Delta x_2, \dots$  na ktoré sme rozdelili podbariérovú oblasť. Pretože platí

$$\prod_i \exp(-\alpha_i) = \exp\left\{\sum_i \alpha_i\right\}$$

môžeme súčin v (8) zapísať aj ako

$$\exp\left\{-\int_a^b \left[\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\right]^{1/2} dx\right\} \quad (9)$$

kde  $a, b$  sú krajné body podbariérovej oblasti, t. j. oblasti, kde  $V(x) > E$ .

Očakávame teda, že výraz (9) bude aspoň hrubým kvalitatívnym priblížením pre zoslabenie amplitúdy vlnovej funkcie pri bariére typu  $V(x)$  na obr. 4.9.

Podrobnejšia analýza, ktorú tu však nebudeme robiť, ukazuje, že (9) je síce užitočným, ale často len veľmi hrubým priblížením.

## 4.8 TROJROZMERNÝ HARMONICKÝ OSCILÁTOR. METÓDA SEPARÁCIE PREMENNÝCH

Úlohy, ktoré vedú k riešeniu jednorozmernej SchR majú značne obmedzenú oblasť použitia. Častejšie sa stretávame s trojrozmernými úlohami. V mnohých a pre aplikácie najdôležitejších úlohách možno často previesť riešenie trojrozmernej úlohy na riešenie troch jednorozmerných úloh. Namiesto pokusu o všeobecný výklad si ukážeme túto metódu, tzv. metódu separácie premenných na jednoduchom príklade trojrozmerného harmonického oscilátora.

Jednorozmerný harmonický oscilátor je opísaný potenciálnou energiou  $V(x) = ma_0^2 x^2/2$ . Prirodzeným zovšeobecnením tohto  $V(x)$  na trojrozmerný

prípád je

$$V(x, y, z) = \frac{m}{2}(\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2) \quad (1)$$

ktorý nazývame všeobecne potenciálom trojrozmerného anizotropného oscilátora. Ak platí  $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega$ , tak hovoríme o izotropnom harmonickom oscilátore. SchR pre pohyb častice v poli potenciálnej energie (1) bude:

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) + \\ & + \frac{m}{2} (\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \end{aligned} \quad (2)$$

Hľadáme riešenie v „separovanom tvare“ (odtiaľ názov metódy)

$$\psi(x, y, z) = A(x)D(y, z) \quad (3)$$

Ak (3) dosadíme do (2) a výsledok delíme súčinom  $A(x)D(y, z)$  po jednoduchšej úprave dostaneme:

$$\begin{aligned} E + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{A(x)} \frac{d^2 A(x)}{dx^2} - \frac{m}{2} \omega_1^2 x^2 = \\ = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{D(y, z)} \left( \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) D(y, z) + \frac{m}{2} (\omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2) \end{aligned} \quad (4)$$

Podarilo sa nám rozdeliť rovnicu tak, že ľavá strana v (4) závisí len od premennej  $x$  a pravá strana len od  $y$  a  $z$ . Odtiaľ však vyplýva, že tak ľavá, ako aj pravá strana v (4) sú konštantné. Označme túto konštantu  $E$  a zapíšme dve takto získané rovnice v tvare

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 A(x)}{dx^2} + \frac{m}{2} \omega_1^2 x^2 A(x) = (E - \bar{E}) A(x) \quad (5)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) D(y, z) + \frac{m}{2} (\omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2) D(y, z) = \bar{E} D(y, z) \quad (6)$$

Riešenie (6) môžeme opäť hľadať v tvare  $D(y, z) = B(y)C(z)$  a po zavedení vhodných konštánt  $E_1, E_2, E_3$  nakoniec dostaneme riešenie rovnice (2) v separovanom tvare

$$\psi(x, y, z) = A(x) B(y) C(z) \quad (7)$$

kde funkcie  $A, B, C$  vyhovujú rovniciam

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 A(x)}{dx^2} + \frac{m}{2} \omega_1^2 x^2 A(x) = E_1 A(x) \quad (8a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 B(y)}{dy^2} + \frac{m}{2} \omega_2^2 y^2 B(y) = E_2 B(y) \quad (8b)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 C(z)}{dz^2} + \frac{m}{2} \omega_3^2 z^2 C(z) = E_3 C(z) \quad (8c)$$

pričom

$$E = E_1 + E_2 + E_3 \quad (8d)$$

Riešenie rovníc (8a, 8b, 8c) však poznáme z článku 4.6. Sú to riešenia diferenciálnej rovnice pre harmonický oscilátor. Každé z riešení závisí od prirodzeného čísla  $n$  a má tvar daný rovnicou (6.15). Riešenie rovnice (2) možno teda zapísať v tvare

$$\psi(x, y, z) = \psi_{n_1}(x) \psi_{n_2}(y) \psi_{n_3}(z) \quad (9)$$

Príslušné hodnoty energie sú:

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \hbar \left[ \omega_1 \left( n_1 + \frac{1}{2} \right) + \omega_2 \left( n_2 + \frac{1}{2} \right) + \omega_3 \left( n_3 + \frac{1}{2} \right) \right] \quad (10)$$

Ostáva nám ešte zistiť, či okrem nájdených riešení (v separovanom tvare) neexistujú aj iné riešenia bezčasovej SchR. Riešenia (9) však tvoria úplný systém funkcií, preto žiadne ďalšie nezávislé riešenia už neexistujú, a teda aj vzťah (10) udáva všetky vlastné hodnoty operátora energie.

Trojrozmerný anizotropný oscilátor, s ktorým sme sa zaoberali, nemá veľa užitočných aplikácií, ale metódu separácie premenných na ňom možno demonštrovať bez veľkého počítania. Oveľa častejšie sa však používa metóda separácie premenných v iných, než karteziánskych súradnicových systémoch, predovšetkým vo sférických súradniciach.

## 4.9 VLASTNÉ HODNOTY A VLASTNÉ FUNKCIE OPERÁTOROV MOMENTU HYBNOSTI

V ďalšom sa budeme zaoberať riešeniami SchR v trojrozmernom prípade so sféricky symetrickým potenciálom. Pri tom budeme používať metódu separácie premenných vo sférických súradniciach. Prv než prídeme k týmto otázkam, je užitočné preskúmať vlastné funkcie a vlastné hodnoty operátorov momentu hybnosti. Ukáže sa totiž, že tieto vlastné funkcie budú udávať uhlovú závislosť riešení zapísaných v separovanom tvare  $R(r) Y(\vartheta, \varphi)$ , kde  $Y(\vartheta, \varphi)$  sú vlastné funkcie operátorov momentu hybnosti.

Podľa vzťahov (2.12.2) sú jednotlivým zložkám momentu hybnosti priradené operátory

$$\begin{aligned}L_x &= y \cdot p_z - p_z \cdot y \\L_y &= z \cdot p_x - p_x \cdot z \\L_z &= x \cdot p_y - p_y \cdot x\end{aligned}\quad (1)$$

Ak si uvedomíme, že podľa (2.12.5) tieto operátory pri vyjadrení vo sférických súradniciach  $r, \vartheta, \varphi$  pôsobia len na uhlové premenné  $\vartheta$  a  $\varphi$ , potom je zrejmé, že pri hľadaní ich vlastných funkcií sa stačí obmedziť na funkcie závislé len od týchto premenných typu  $\psi(\vartheta, \varphi)$ .

Ak skonštruujeme ešte operátor druhej mocniny momentu hybnosti

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \quad (2)$$

potom po jednoduchých výpočtoch, ktoré prenechávame čitateľovi, možno zo vzťahov (1) a (2) odvodiť komutačné vzťahy

$$\begin{aligned}[L_x, L_y] &= i\hbar L_z \\[L_y, L_z] &= i\hbar L_x \\[L_z, L_x] &= i\hbar L_y \\[L^2, L_x] &= [L^2, L_y] = [L^2, L_z] = 0\end{aligned}\quad (3)$$

Z komutačných vzťahov (3) je zrejmé, že z operátorov  $L_x, L_y, L_z, L^2$  možno vybrať najviac dva, ktoré navzájom komutujú. Nech sú to napríklad operátory  $L^2$  a  $L_z$ . Podľa diskusie v článku 2.16 je potom zrejmé, že sa možno pokúsiť nájsť spoločný systém vlastných funkcií týchto dvoch operátorov.

V sférických súradniciach podľa (2.12.5, 6) platí

$$\begin{aligned}L_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \\L^2 &= -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]\end{aligned}\quad (4)$$

Budeme teda hľadať vlastné funkcie  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  spĺňajúce vzťahy

$$\begin{aligned}L_z Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= m\hbar Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \\L^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)\end{aligned}\quad (5)$$

kde  $m, l$  sú zatiaľ ľubovoľné reálne čísla.<sup>74</sup>

<sup>74</sup> Poznamenajme, že vzťahy (5) sú obvyklé vzťahy platné pre vlastné funkcie, ibaže príslušné vlastné hodnoty sú zapísané v nezvyklom tvare. Treba si uvedomiť, že ľubovoľné kladné číslo možno zapísať napr. v tvare  $\hbar^2 l(l+1)$ , kde  $l$  je vhodné reálne číslo. Nezvyklý tvar bude v ďalšom užitočný.



Riešenie rovníc (5) budeme hľadať opäť v separovanom tvare

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)$$

keď sme na pravej strane závislosť od  $l, m$  explicitne nevypisovali. Po dosadení do (5) dostaneme rovnice

$$\frac{d}{dt}\Phi = im\Phi \quad (6)$$

$$\left[ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{d}{d\vartheta} \right) + l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \right] \Theta = 0 \quad (7)$$

Riešenie rovnice (6) má tvar

$$\Phi = Ce^{im\varphi} \quad (8)$$

Funkcia  $\Phi(\varphi)$  však musí byť taká, aby platilo

$$\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi) \quad (9)$$

lebo fyzikálne dva body, ktorých súradnica  $\varphi$  sa líši o  $2\pi$  sú totožné (rotácia o  $2\pi$ ). Z podmienky (9) a vzťahu (8) je zrejmé, že pre vlastné hodnoty musí platiť:

$$m \text{ je celé číslo} \quad (10)$$

Ostáva teda riešiť rovnicu (7) s obmedzením sa na celé čísla  $m$  a nájsť funkcie  $\Theta(\vartheta)$  ako aj vlastné hodnoty  $l(l+1)$ . Neuvedieme si tu detailne celý postup, len naznačíme spôsob riešenia.

V rovnici (7) je užitočné urobiť substitúciu  $x = \cos \vartheta$ . Po jednoduchých úpravách dostaneme

$$\left[ (1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] \Theta = 0$$

Hľadáme regulárne riešenie tejto rovnice na intervale  $(-1, 1)$  (čo odpovedá  $\vartheta \in (0, \pi)$ ). Postupom v zásade podobným ako pri harmonickom oscilátore<sup>75</sup> by sme zistili, že fyzikálne prijateľné riešenie existuje iba v prípade, že  $l$  je celé nezáporné číslo, pričom platí

$$l \geq |m| \quad (12)$$

V takomto prípade má potom riešenie tvar

$$\Theta = (1-x^2)^{|m|/2} \Theta(x)$$

<sup>75</sup> Odfaktorizovanie riešenia v okolí singulárnych bodov 1 a -1 a následné hľadanie riešenia v tvare mocninového radu.

kde  $\Theta(x)$  je polynóm stupňa  $l - |m|$ . Riešenia rovnice (11) tohto typu sú dobre známe, sú to pridružené Legendrove funkcie  $P_l^{m|}(x)$ . Ich definícia a niektoré vlastnosti sú uvedené v dodatku A3.

Zrekapitulujeme získané výsledky:

Vlastné funkcie  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  operátorov  $L^2$  a  $L_z$  spĺňajúce vzťahy (5) zodpovedajú hodnotám

$$l = 0, 1, 2, \dots \quad \text{a } m \text{ celé} \quad (13)$$

a sú dané vzťahom

$$Y_{lm} = C_{lm} P_l^{m|}(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (14)$$

kde  $P_l^{m|}$  sú pridružené Legendrove funkcie.

Vlastné hodnoty operátorov  $L^2$  a  $L_z$  zodpovedajúce spoločným vlastným funkciám teda sú

$$\hbar^2 l(l+1), \quad l \text{ celé} \quad (15)$$

a

$$\hbar m, \quad m \in \langle -l, l \rangle, m \text{ celé} \quad (16)$$

Normovací koeficient volíme konvenčne tak, aby funkcie  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  boli normované na guľovej ploche jednotkového polomeru, t. j. aby platilo

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta Y_{lm}^* Y_{lm} = 1$$

V obvyklej fázovej konvencii potom platí:

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m \left[ \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^{m|}(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (17)$$

$$Y_{l,-m}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) \quad \text{pre } -m < 0 \quad (18)$$

Táto pomerne komplikovaná fázová konvencia je motivovaná požiadavkou, aby

$$Y_{l0}(0, 0) \text{ bolo reálne a kladné} \quad (19)$$

a aby bol splnený dôležitý<sup>76</sup> rekurentný vzťah

$$L_\pm Y_{lm} = \hbar[l(l+1) - m(m \pm 1)]^{1/2} Y_{l, m \pm 1} \quad (20)$$

<sup>76</sup> Dôležitosť tohto vzťahu bude zrejma až v kapitole 11.

kde  $L_+$  a  $L_-$  sú operátory definované vzťahom

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y \quad (21)$$

Uvedieme ešte bez dôkazov niekoľko ďalších vlastností funkcií  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ , ktorým sa tiež hovorí sférické funkcie.

1. Sférické funkcie tvoria na jednotkovej guli úplný systém ortonormovaných funkcií. Vzťah ortonormovanosti je

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin \vartheta d\vartheta Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l'm'}(\vartheta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (22)$$

Vzhľadom na úplnosť tohto systému môžeme každú regulárnu funkciu definovanú na jednotkovej guli rozvinúť do radu podľa sférických funkcií. Z toho tiež vyplýva, že žiadne ďalšie nezávislé vlastné funkcie operátorov  $L^2$  a  $L_z$  už neexistujú.<sup>77</sup>

2. Parita sférických funkcií je  $(-1)^l$ , to znamená, že platí

$$Y_{lm}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (23)$$

3. 
$$Y_{lm} = (-1)^l Y_{l, -m}^* \quad (24)$$

4. Niekoľko najnižších sférických funkcií

$$\begin{aligned} Y_{00}(\vartheta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, & Y_{20}(\vartheta, \varphi) &= \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left( \frac{3}{2} \cos^2 \vartheta - \frac{1}{2} \right) \\ Y_{11}(\vartheta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\varphi}, & Y_{21}(\vartheta, \varphi) &= -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i\varphi} \\ Y_{10}(\vartheta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta, & Y_{22}(\vartheta, \varphi) &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{2i\varphi} \end{aligned} \quad (25)$$

Funkcie  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  pre  $l \leq 2$  a pre  $m < 0$  možno získať z predchádzajúcich pomocou vzťahu (24).

Poznamenajme na záver, že tento článok bol pomerne technický, hoci sme nezachádzali do detailov. Hlbší fyzikálny pohľad na túto problematiku bude možné získať v kapitole venovanej všeobecnému formalizmu momentu hybnosti. Niektoré výsledky, ktoré sme tu získali pomerne namáhavo – ako napríklad vlastné hodnoty (15), (16) – tam dostaneme veľmi rýchlo a navyše oveľa názornejšie.

<sup>77</sup> A priori totiž nemusí byť pravdou, že metódou separácie premenných nájdeme všetky vlastné funkcie.

## 4.10 SEPARÁCIA PREMENNÝCH V SFÉRICKÝCH SÚRADNICIACH

Sférické súradnice  $r$ ,  $\vartheta$ ,  $\varphi$  sú viazané s karteziánskymi  $x$ ,  $y$ ,  $z$  známymi vzťahmi

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \vartheta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \vartheta$$

ktoré možno ľahko obrátiť na

$$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$$

$$\vartheta = \arccos (z/r)$$

$$\varphi = \arctg (y/x)$$

pričom derivácie v jedných premenných možno previesť na derivácie v druhých podľa vzťahov typu

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

a pod.

Laplaceov operátor

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

môžeme previesť do sférických súradníc buď ťažkopádny a namáhavým spôsobom pomocou predchádzajúcich vzťahov, alebo jednoduchšie pomocou *Lamého*<sup>78</sup> koeficientov. Obidvomi spôsobmi prídeme k nasledujúcemu vyjadreniu

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \nabla_{\vartheta, \varphi}^2 \quad (1)$$

kde

$$\nabla_{\vartheta, \varphi}^2 = \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (2)$$

<sup>78</sup> Pozri napr. Stratton, J. A.: Teorie elektromagnetického pole. Praha, SNTL 1961.

Schrödingerova rovnica pre sféricky symetrický potenciál potom bude:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \nabla_{\vartheta, \varphi}^2 \right\} \psi(r, \vartheta, \varphi) + V(r) \psi(r, \vartheta, \varphi) = E \psi(r, \vartheta, \varphi) \quad (3)$$

Hľadáme jej riešenie v „separovanom“ tvare

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y(\vartheta, \varphi) \quad (4)$$

Keď budeme postupovať podobne ako v článku 4.9, pre  $R$  a  $Y$  dostaneme<sup>79</sup>

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{\lambda}{r^2} \right\} R(r) = 0 \quad (5)$$

$$\nabla_{\vartheta, \varphi}^2 Y(\vartheta, \varphi) + \lambda Y(\vartheta, \varphi) = 0 \quad (6)$$

Ak porovnáme rovnicu (2) so vzťahom (9.7), vidíme že platí

$$L^2 = -\hbar^2 \nabla_{\vartheta, \varphi}^2$$

a preto môžeme (6) prepísať aj v tvare

$$L^2 Y(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 \lambda Y(\vartheta, \varphi) \quad (7)$$

Vidíme, že funkcie  $Y(\vartheta, \varphi)$ , ktoré sú riešením (7), budú sférickými funkciami  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  a že  $\lambda$  v rovnici (7) môže nadobúdať len hodnoty

$$l = l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (7')$$

Po dosadení zo (7') do (5) dostaneme:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R(r) = 0 \quad (8)$$

Rovnica (8) sa nazýva radiálnou (Schrödingerovou) rovnicou alebo presnejšie rovnicou pre radiálnu vlnovú funkciu  $R(r)$ . Rovnica pre  $Y(\vartheta, \varphi)$  vôbec nezávisí od hodnoty  $E$ , ani od tvaru potenciálnej energie  $V(r)$ . Ak poznáme vlastnosti sférických funkcií  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ , tak ich môžeme použiť pre každý sférický symetrický potenciál. Pri danom  $V(r)$  stačí vyriešiť rovnicu (8), z ktorej určujeme aj povolené hodnoty energie (kvantové hladiny sústavy).

<sup>79</sup> Postupujeme tak, že (4) dosadíme do (3), výsledok predelíme súčinom  $R(r)Y(\vartheta, \varphi)$  a po malej úprave sa nám podarí rovnicu zapísať tak, aby ľavá strana závisela iba od  $r$  a pravá iba od premenných  $\vartheta, \varphi$ . Preto sa obe strany musia rovnať konštante  $A$ , ktorá nezávisí ani od  $r$  ani od  $\vartheta$  a  $\varphi$ .

Príčina takejto univerzálnosti spočíva v tom, že v prípade sféricky symetrického potenciálu hamiltonián komutuje s operátormi momentu hybnosti, teda že platí (ako sa možno presvedčiť jednoduchým výpočtom):

$$[H, L_x] = [H, L_y] = [H, L_z] = [H, L^2] = 0$$

Spolu s hamiltoniánom teda máme (podľa predchádzajúceho článku) trojicu komutujúcich operátorov

$$H, L^2, L_z$$

Možno preto nájsť sústavu vlnových funkcií, ktoré budú súčasne vlastnými funkciami všetkých troch operátorov  $H, L^2, L_z$ . Z predchádzajúceho je zrejmé, že metóda, ktorá vedie k takémuto systému vlastných funkcií, je práve separácia premenných vo sférických súradniciach. Predtým, ako pristúpime k riešeniu rovnice (8) pre konkrétne prípady  $V(r)$ , si ešte všimneme význam člena  $l(l+1)/r^2$  v radiálnej rovnici a odvodíme niektoré podmienky pre radiálnu funkciu  $R(r)$ , vyplývajúce z normovacej podmienky.

*Fyzikálny význam člena  $l(l+1)/r^2$  v radiálnej rovnici.* Rovnicu (8) možno tiež zapísať v tvare

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) R(r) = 0$$

kde

$$V_l(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (9)$$

Posledný člen v rovnici (9) možno formálne interpretovať ako potenciálnu energiu príslušnú „odstredivej“ sile. V klasickej mechanike je odstredivá sila (pre jednoduchosť uvažujeme pohyb po kruhovej dráhe) daná ako  $F = mv^2/r = L^2/mr^3$ , kde  $L = rp = mvr$  je moment hybnosti. Ak zavedieme potenciál  $V_{od}(r)$  pomocou vzťahu  $F = -V_{od}(r)/dr$ , dostaneme:

$$V_{od}(r) = \frac{L^2}{2mr^2}$$

Druhý člen na pravej strane rovnice (9) má práve tento tvar, len namiesto klasickej veličiny  $L^2$  stojí vlastná hodnota operátora  $L^2$ , teda podľa (9.5) výraz  $\hbar^2 l(l+1)$ .

*Podmienky normovania pre radiálnu vlnovú funkciu  $R(r)$ .* Ak zapíšeme riešenie SchR v tvare (4) s tým, že za  $Y(\vartheta, \varphi)$  dosadíme  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ , môžeme normováciu podmienku zapísať v tvare

$$\int_0^\infty dr r^2 |R(r)|^2 \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{lm}^* Y_{lm} = 1 \quad (11)$$

Sférické funkcie spĺňajú podmienku (9.22) a normovacia podmienka pre radiálne funkcie bude

$$\int_0^{\infty} |R(r)|^2 r^2 dr = 1 \quad (12)$$

Podobne ako v (3.4) dostaneme pre priebeh funkcie  $R(r)$  v okolí bodov  $r \rightarrow 0$  a  $r \rightarrow \infty$  ohraničenia

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r^{3/2} R(r) = 0 \quad \lim_{r \rightarrow 0} r^{3/2} R(r) = 0 \quad (13)$$

Rovnice (13) boli odvodené len z podmienky normovania, nezávisia teda vôbec od tvaru potenciálnej energie  $V(r)$ . Väčšina  $V(r)$ , vyskytujúcich sa v praktických aplikáciách, avšak spĺňa podmienku  $r^2 V(r) \rightarrow 0$  pre  $r \rightarrow 0$  a pre takéto potenciály možno správanie sa radiálnej funkcie v okolí začiatku preskúmať bližšie. V rovnici (8) možno v malom okolí bodu  $r = 0$  zanedbať člen  $[E - V(r)]$  voči  $l(l+1)/r^2$  a rovnica prejde na tvar

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R = 0 \quad (14)$$

Hľadáme jej riešenie v tvare

$$R(r) = r^n (a_0 + a_1 r + \dots), \quad a_0 \neq 0 \quad (15)$$

Ak dosadíme (15) do (14) a porovnáme koeficienty pri najnižšej mocnine  $r$ , dostaneme podmienku:  $n(n+1) - l(l+1) = 0$ . Posledná kvadratická rovnica má dve riešenia:

$$n = 1 \quad n = -(l+1) \quad (16)$$

Pre  $l \geq 1$  podmienka (13) vylučuje možnosť  $n = -(l+1)$  a pre tieto hodnoty máme

$$R(r) \sim r^l \quad \text{pre } r \rightarrow 0 \quad (17)$$

Podmienka (13) však nemôže vylúčiť jednu z možností (16) pre  $l = 0$ . Prípad  $R(r) \sim r^{-1}$  však možno vylúčiť nasledujúcou úvahou (pozri [2], VIII. kap.): pre  $l = 0$  platí  $Y_{00}(\vartheta, \varphi) = 1/\sqrt{4\pi}$ , a preto  $\psi(r, \vartheta, \varphi) = R_0(r) Y_{00}$  sa správa pre malé  $r$  ako  $1/r$ . V SchR

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right\} \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r})$$

má potom v dôsledku rovnice

$$-\nabla^2(r^{-1}) = 4\pi\delta(\mathbf{r}) \quad (18)$$

prvý člen singularitu typu  $\delta$ -funkcie, zatiaľ čo druhé dva členy ju nemajú.<sup>80</sup> Pre potenciály, pre ktoré  $r^2V(r) \rightarrow 0$  pre  $r \rightarrow 0$  platí teda (17) pre všetky  $l$ .

## 4.11 ATÓM VODÍKA

Atóm vodíka je sústava dosť jednoduchá na to, aby sa dala matematicky zvládnuť a dostatočne bohatá v tom zmysle, že obsahuje podstatné črty kvantovo-mechanického opisu. E. Fermi raz vraj poznamenal, že teória elementárnych častíc by už bola v oveľa pokročilejšom štádiu, keby v tejto oblasti fyziky existoval „atóm vodíka“.

V prvom priblížení možno považovať protón v jadre atómu vodíka za nehybný a umiestnený v začiatku súradnicovej sústavy.<sup>81</sup> Potenciálna energia elektrónu v poli protónu je

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e'^2}{r} \quad (1)$$

kde sme zaviedli označenie

$$e'^2 \equiv e^2/4\pi\epsilon_0$$

Pre radiálnu vlnovú funkciu dostávame potom z (10.8) rovnicu

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{e'^2}{r} \right) R - \frac{l(l+1)}{r^2} R = 0 \quad (2)$$

V tejto časti sa budeme zaoberať len s viazanými stavmi, ktoré vďaka tomu, že  $V(r) \rightarrow 0$  pre  $r \rightarrow \infty$  budú mať záporné energie. Zavedieme bezrozmernú premennú

$$\rho = \alpha r, \quad \alpha = [-8mE/\hbar^2]^{1/2} \quad (3)$$

a rovnicu (2) môžeme prepísať na tvar

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left( \rho^2 \frac{dR}{d\rho} \right) + \left[ -\frac{1}{4} + \frac{\beta}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0 \quad (4)$$

<sup>80</sup> Predchádzajúca rovnica je dobre známa z elektrostatiky. Pre bodový náboj v začiatku súradnicovej sústavy bude hustota náboja  $\rho(r)$  úmerná  $\delta(r)$ . Potenciál budený týmto nábojom je  $1/r$ . Stačí teraz dosadiť takéto  $\varphi(r)$  a  $\rho(r)$  do rovnice  $\nabla^2\varphi = -4\pi\rho$ . S tým, že bodovému náboju odpovedá  $\rho(r) \sim \delta(r)$ , kde  $\delta(r)$  je Diracova  $\delta$ -funkcia, sa ešte zoznámime podrobnejšie neskôr. Prosíme čitateľa, aby tvrdeniu pred (18) uveril aj bez zatiaľ zrozumiteľného argumentu.

<sup>81</sup> Hmotnosť protónu je približne 1840-krát väčšia ako hmotnosť elektrónu. Korekciami na pohyb protónu sa budeme zaoberať v nasledujúcom článku.



kde

$$\beta = \left( -\frac{me'^4}{2E\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (4')$$

Singulárnymi bodmi rovnice (4) sú  $\rho \rightarrow \infty$  a  $\rho = 0$ . Preskúmame najprv správanie sa  $R(\rho)$  v okolí prvého z nich. Ak pre veľké  $\rho$  zachováme v (4) len dominantné členy, dostaneme asymptotický tvar rovnice (4):

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} - \frac{1}{4} R = 0 \quad (5)$$

Pri úprave sme rozpísali derivácie v (4) a zanedbali člen obsahujúci faktor  $1/\rho$ . Všeobecné riešenie (5) je

$$R(\rho) = C_1 e^{-\rho/2} + C_2 e^{\rho/2}$$

Aby  $R(\rho)$  bolo normovateľné, musí sa  $C_2 = 0$ . Navyše, pódia (10.17) platí:

$$R(\rho) \sim \rho^l \text{ pre } \rho \rightarrow 0, l = 0, 1, 2, \dots$$

Riešenie rovnice (4) hľadáme preto v tvare

$$R(\rho) = \rho^l e^{-\rho/2} L(\rho), \quad L(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^k \quad a_0 \neq 0 \quad (6)$$

Ak dosadíme (6) do (4), dostaneme pre  $L(\rho)$  diferenciálnu rovnicu

$$\rho \frac{d^2 L}{d\rho^2} + [2(l+1) - \rho] \frac{dL}{d\rho} + (\beta - l - 1)L = 0 \quad (7)$$

Po dosadení mocninového radu pre  $L(\rho)$  do (7) dostaneme rekurentný vzťah medzi koeficientmi  $c_k$

$$c_{k+1} = \frac{k+l+1-\beta}{(k+1)(k+2l+2)} c_k$$

Z rovnice (8) okamžite vidieť, že pre  $\beta$  rôzne od celého kladného čísla bude  $c_{k+1}/c_k \rightarrow 1/k$  pre  $k \rightarrow \infty$ . Taký istý pomer koeficientov má aj rozvoj

$$e^\rho = \sum_{k=0}^{\infty} b_k \rho^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \rho^k$$

Ak teda rad pre  $L(\rho)$  obsahuje nekonečný počet členov, tak pre  $\rho \rightarrow \infty$   $L(\rho) \rightarrow \exp(\rho)$  a radiálna vlnová funkcia  $R(\rho)$  v tomto prípade nie je

normovateľná.<sup>82</sup> Fyzikálne prijateľné riešenia dostaneme vtedy, ak rad pre  $L(\rho)$  sa redukuje na polynóm konečného stupňa. To sa stane len pre  $\beta = n_r + l + 1$ , kde nezáporné celé číslo  $n_r$  určuje stupeň polynómu  $L(\rho)$ . Číslo  $n_r$  nazývame radiálnym kvantovým číslom. To, že pre  $\beta$  sú dovolené len určité diskkrétne hodnoty  $\beta = n$ , implikuje podľa (4) aj kvantovanie energie, ktorá môže nadobúdať len hodnoty

$$E_n = -\frac{me'^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{me'^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} \quad n = n_r + l + 1 = 1, 2, 3, \dots \quad (9)$$

Tento výsledok je totožný so vzorcom, ktorý odvodil N. Bohr už v rámci „starej“ kvantovej teórie.

Ak za  $\beta$  dosadíme do rovnice (7), zistíme, že polynómy  $L(\rho)$  splňajú diferenciálnu rovnicu

$$\left\{ \rho \frac{d^2}{d\rho^2} + [2(l+1) + 1 - \rho] \frac{d}{d\rho} + (n-l-1) \right\} L(\rho) = 0$$

Takéto polynómy možno pomocou rekurentných vzťahov (8) ľahko skonštruovať, v matematike sú dobre známe a volajú sa Laguerrove polynómy. Niektoré ich vlastnosti sú zhrnuté v dodatku A4.

V konvencii označenia podľa (A4.2) majú riešenia rovnice (10) tvar

$$L(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$$

a riešenia úplnej SchR sú

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = N_{nl} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

kde<sup>83</sup>

$$\rho = r \cdot \frac{2}{na_1}, \quad a_1 = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{me^2} \quad (12)$$

Veličina  $a_1$  sa nazýva Bohrov polomer.

Podľa toho čo sme už uviedli, kvantové čísla  $n, l, m$  môžu nadobúdať hodnoty

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots \\ l &= 0, 1, 2, \dots, n-1 \\ m &= -l, -l+1, \dots, l-1, l \end{aligned} \quad (13)$$

<sup>82</sup> Tu sa opakuje podobná situácia ako pri lineárnom harmonickom oscilátore. Ak rad neodtrháme, potom výraz  $L(\rho)e^{-\rho/2}$  konverguje pre  $\rho \rightarrow \infty$  zas k „zlému“ riešeniu  $\exp(\rho/2)$ .

<sup>83</sup> Dosadili sme do (3) zo vzťahu (9).

Vo vzťahu (11) je  $N_{nl}$  normovacou konštantou. S využitím vlastností Laguerrových polynómov a sférických funkcií by sa ľahko dalo ukázať, že normované vlnové funkcie dostaneme pre

$$N_{nl} = \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}} \cdot a_1^{-3/2} \quad (14)$$

Výraz

$$R_{nl}(r) = N_{nl} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \quad (15)$$

je (v terminológii podľa predchádzajúceho odstavca) radiálnou vlnovou funkciou, normovanou podľa (10.12). Niekoľko najnižších radiálnych funkcií vypíšeme explicitne.

$$\begin{aligned} R_{10}(r) &= (1/a_1)^{3/2} \cdot 2e^{-r/a_1} \\ R_{20}(r) &= (1/2a_1)^{3/2} (2 - r/a_1)e^{-r/2a_1} \\ R_{21}(r) &= (1/2a_1)^{3/2} \frac{r}{a_1\sqrt{3}} e^{-r/2a_1} \end{aligned} \quad (16)$$

Pre viaceré aplikácie je užitočné poznať stredné hodnoty mocnín  $r$  počítané podľa vzťahu

$$\bar{r}^k = \int r^k \psi_{nlm}^*(r, \vartheta, \varphi) \psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) r^2 dr \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$$

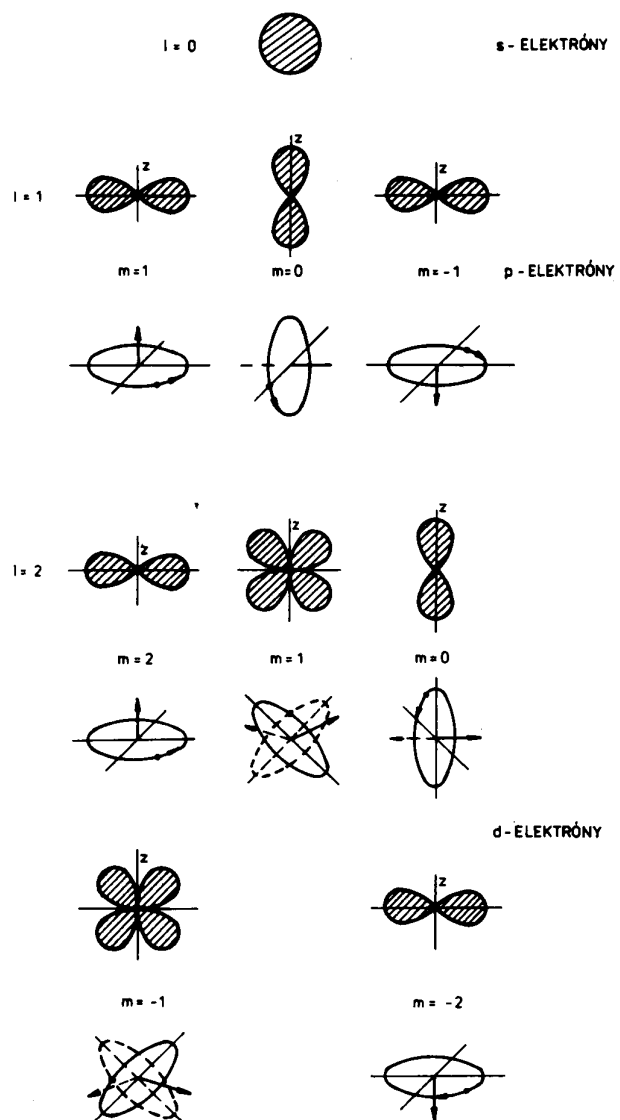
Jednoduchými ale zdĺhavými výpočtami možno ukázať, že platí

$$\begin{aligned} \bar{r} &= \frac{1}{2}[3n^2 - l(l+1)]a_1 \\ \bar{r}^2 &= \frac{1}{2}[5n^2 + 1 - 3l(l+1)]n^2 a_1^2 \\ \frac{1}{\bar{r}} &= \frac{1}{n^2 a_1} \\ \frac{1}{\bar{r}^2} &= \frac{2}{(2l+1)n^3 a_1^2} \end{aligned} \quad (17)$$

Hustoty pravdepodobností pre niektoré stavy atómu vodíka sú znázornené na obr. 4.10.

Zrekapitulujme:

Vlnové funkcie  $\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi)$  sú súčasne vlastnými funkciami troch operátorov



Obr. 4.10. Druhé mocniny absolútnych hodnôt vlnových funkcií elektrónov v  $s$ ,  $p$  a  $d$  stavoch. Párne riadky naznačujú klasické analógie a treba ich chápať ako pomôcku na zapamätanie.

$H, L^2$  a  $L_z$ . Pritom platí:

$$H\psi_{nlm} = E_n\psi_{nlm} \quad E_n = -\frac{me'^4}{2\hbar^2n^2}$$

$$L^2\psi_{nlm} = \hbar^2l(l+1)\psi_{nlm} \quad (18)$$

$$L_z\psi_{nlm} = \hbar m\psi_{nlm}$$

Zadanie troch čísiel  $n, l, m$  jednoznačne určuje funkciu  $\psi_{nlm}$ . Ako vidno z rovníc (18), hlavné kvantové číslo  $n$  určuje energiu. Číslo  $l$  nazývame orbitálnym kvantovým číslom, určuje vlastné hodnoty operátora druhej mocniny momentu hybnosti – teda absolútnu veľkosť momentu hybnosti. Číslo  $m$ , ktoré určuje priemet momentu hybnosti do smeru osi  $z$ , nazývame magnetickým kvantovým číslom. Ak sa totiž atóm nachádza vo vonkajšom magnetickom poli, a ak vyberieme os  $z$  v smere tohto vonkajšieho póla, tak kvantové číslo  $m$  bude určovať interakciu elektrónu na danej hladine s vonkajším poľom.

Pauliho nerelativistickú teóriu spinu, aplikovanú na atóm vodíka, opíšeme neskôr.

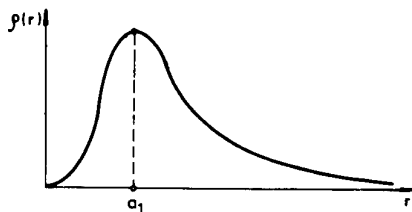
Súvis medzi „starou“ a „novou“ kvantovou teóriou je ilustrovaný nasledujúcim príkladom. V Bohrovom modeli atómu vodíka sa elektrón v stave s najnižšou energiou pohybuje po kruhovej dráhe s polomerom  $a_1$ . V „novej“ kvantovej mechanike je tento stav elektrónu opísaný vlnovou funkciou

$$\psi_{100}(r, \vartheta, \varphi) = Y_{00}(\vartheta, \varphi) \quad R_{10}(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}(a_1)^{-3/2}.2e^{-r/a_1}$$

Pri integrovaní vo sférických súradniciach objemový element je  $dV = 4\pi r^2 dr$  (presnejšie: objemový element, integrovaný cez uhlové premenné  $\vartheta$  a  $\varphi$ ). Súčin

$$\bar{\rho} = 4\pi r^2 |\psi_{100}(r, \vartheta, \varphi)|^2 = 4r^2 a_1^{-3} e^{-2r/a_1} \quad (19)$$

interpretujeme ako hustotu pravdepodobnosti pre výskyt elektrónu vo vzdialenosti  $r$  od začiatku súradnicovej sústavy. Graficky je závislosť  $\bar{\rho}(r)$  znázornená na obr. 4.11. Z obrázka, práve tak ako z analytického tvaru (19) vidno, že  $\bar{\rho}(r)$  dosahuje maximum práve pre  $r = a_1$ .



Obr. 4.11

*Degenerácia hladín energie.* Ak k jednej a tej istej hodnote energie prislúcha niekoľko rôznych vlnových funkcií, hovoríme o degenerácii hladín energie. Typickým príkladom pre degeneráciu sú riešenia SchR pre atóm vodíka. Vlnová funkcia  $\psi(r)$  je jednoznačne určená tromi celými číslami:  $n, l, m$ . Hodnoty  $n, l, m$  sú viazané nerovnosťami

$$|m| \leq l, \quad 0 \leq l \leq n - 1 \quad (20)$$

Energia prislúchajúca danej vlnovej funkcii je však určená podľa (18) len hlavným kvantovým číslom  $n$ . Ku každej hodnote energie prislúcha teda toľko vlnových funkcií  $\psi_{nlm}$ , koľko celých čísel spĺňa nerovnosti (20) pri pevnom  $n$ . Ku každému  $l$  možno nájsť  $2l + 1$  čísel  $m$ , spĺňajúcich (20); povolené hodnoty  $m$  sú  $m = -l, -l + 1, \dots, l$ . Podľa druhej nerovnosti (20) k danému  $n$  môžeme teda nájsť

$$N_n = 1 + 3 + \dots + 2n - 1 = n^2 \quad (21)$$

rôznych dvojíc  $l, m$ .

Vo všeobecnom prípade centrálne symetrického poľa bude každá energetická hladina  $(2l + 1)$ -krát degenerovaná. Tvrdenie vyplýva z tvaru rovnice pre radiálnu časť vlnovej funkcie (10.8), ktorá závisí len od  $l$  a od radiálneho kvantového čísla  $n_r$ , ktoré sa zavádza v priebehu riešenia. Pretože hodnota energie vystupuje len v rovnici pre  $R(r)$  a nie v rovnici pre  $Y(\vartheta, \varphi)$ ,  $E$  nezávisí od magnetického kvantového čísla  $m$ . Ku každej dvojici  $n_r, l$  možno však nájsť  $2l + 1$  hodnôt  $m$ , a teda riešenia budú  $(2l + 1)$ -krát degenerované. Neskôr ešte ukážeme, že degenerácia úzko súvisí s vlastnosťami symetrie  $V(r)$  a Laplaceovho operátora. Tak napr.  $(2l + 1)$ -násobná degenerácia v sféricky symetrickom poli je práve dôsledkom sférickej symetrie. Operátor energie pre coulombovský potenciál, úmerný  $1/r$ , má špeciálne vlastnosti symetrie,<sup>84</sup> ktoré spôsobujú  $n^2$ -násobnú degeneráciu. Pri viac-elektrónových atómoch sa elektróny pohybujú v strednom poli jadra a ostatných elektrónov, potenciál už nie je presne coulombovský a  $n^2$ -násobná degenerácia sa stráca.

Poznamenajme ešte na záver, že teóriu atómu vodíka možno priamo aplikovať na ióny podobné vodíku (ktoré obsahujú jediný elektrón) ako  $\text{He}^+, \text{Li}^{++}$  atď. Stačí všade nahradiť  $e^2$  výrazom  $Ze^2$ , kde  $Z$  je náboj jadra, a urobiť korekciu na pohyb jadra, o ktorej budeme hovoriť v nasledujúcom článku.

## 4.12 KOREKCIA NA POHYB JADRA

Doteraz sme považovali protón za fixovaný v začiatku súradnej sústavy a elektrón sa pohyboval v silovom poli tohto statického protónu. Takéto priblíženie by

<sup>84</sup> Pozri napr. Baz, A. I. – ZeMovič, J. B. – Perelomov, A. M.: Rassejaniye, reakcii i raspady v nereljativistskoj kvantovoj mechanike, Moskva 1971.

bolo celkom korektné iba pre nekonečne ťažký protón.<sup>85</sup> V skutočnosti má protón konečnú hmotnosť  $m_p$ , hoci v porovnaní s hmotnosťou elektrónu  $m = m_e$  veľmi veľkú;  $m_e/m_p \approx 1/1840$ . Môžeme teda očakávať, že výrazy, ktoré sme odvodili pre energiu atómu vodíka v predchádzajúcom článku, bude treba poopraviť započítaním dôsledkov konečnej hmotnosti protónu. V klasickej fyzike je tento problém jednoduchý. Vieme, že ťažisko izolovanej sústavy je v klúde a dve častice sa pohybujú tak, že obiehajú okolo tohto ťažiska. V kvantovej mechanike problém nie je oveľa komplikovanejší. Pre dvojčasticovú sústavu treba zase zaviesť súradnicu ťažiska a relatívnu súradnicu a riešiť príslušnú SchR. Ukazuje sa, že túto rovnicu možno separovať a ako výsledok dostaneme pre relatívny pohyb rovnicu veľmi blízku tej SchR, ktorá opisuje pohyb častice v silovom poli nehybnej a nekonečne ťažkej častice.

Teraz to ideme previesť podrobnejšie. Uvažujeme sústavu skladajúcu sa z dvoch častíc; ich súradnice označíme  $\mathbf{r}_1$  a  $\mathbf{r}_2$ . Nech ich vzájomné silové pôsobenie opisuje potenciálna energia  $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ . Operátor celkovej energie sústavy sa bude skladať z operátorov kinetickej energie prvej častice, kinetickej energie druhej častice a potenciálnej energie vzájomného pôsobenia. Máme teda

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (1)$$

kde

$$\nabla_1^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2}$$

a analogický význam má aj  $\nabla_2^2$ . Zavedme teraz relatívnu súradnicu  $\mathbf{r}$  a súradnicu hmotného stredy  $\mathbf{R}$  vzťahmi

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \\ \mathbf{R} &= \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{M} \quad M = m_1 + m_2 \end{aligned}$$

Po elementárnych výpočtoch môžeme operátor  $H$  vyjadriť v súradniciach  $\mathbf{r}$  a  $\mathbf{R}$ . Dostaneme:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{\hbar^2}{2M}\tilde{\nabla}^2 + V(\mathbf{r})$$

kde  $\mu$  je redukovaná hmotnosť

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (4)$$

<sup>85</sup> Pre neurčitosť polohy a hybnosti platí podľa vzťahu neurčitosti  $\Delta x \Delta p_x \sim \hbar$ . Ak položíme  $\Delta p_x = m \Delta v_x$  máme  $\Delta x \Delta v_x \sim \hbar/m_p$ . V limite  $m_p \rightarrow \infty$  môžeme považovať protón za lokalizovaný v začiatku ( $\Delta x \sim 0$ ) a nehybný ( $\Delta v_x \sim 0$ ).

a Laplaceove operátory  $\nabla^2$  a  $\tilde{\nabla}^2$  sú:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \tilde{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2}$$

Vlastné funkcie operátora  $H$  možno zrejme hľadať v separovanom tvare  $\psi(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{R})$ . Druhá z nich opisuje pohyb sústavy ako celku. Funkcia  $\psi(\mathbf{r})$  opisuje relatívny pohyb dvoch častíc a spĺňa zvyčajnú Schrödingerovu rovnicu, len namiesto hmotnosti jednej z častíc vystupuje v nej redukovaná hmotnosť sústavy (4). Ak napr. častica 1 je elektrón a 2 protón, tak

$$\mu = m_1 \frac{m_2}{m_1 + m_2} \approx m_1 \frac{1840}{1841}$$

a  $\mu \approx m_1$ . Zahrnutie korekcií na pohyb jadra sa teda prejaví iba v tom, že vo všetkých vzťahoch predchádzajúceho článku nahradíme hmotnosť elektrónu redukovanou hmotnosťou určenou podľa (5).

### 4.13 ZHRNUTIE

V tejto kapitole sme sa zaoberali s niektorými exaktne riešiteľnými problémami pohybu jedinej častice v poli vonkajších síl. Niektoré zo študovaných otázok boli viac fyzikálnej, iné viac matematickej povahy. Naliehavo odporúčame čitateľovi, aby sa snažil uvedomiť si v každom probléme jeho fyzikálnu podstatu, alebo – snáď presnejšie povedané – fyzikálnu logiku problému. Technické podrobnosti môže, v prípade ak ich bude potrebovať, nájsť v monografiách o kvantovej mechanike, alebo v odbornej literatúre o špeciálnych funkciách matematickej fyziky.

V záverečnom článku upozorníme na niektoré otázky, ktoré je zvlášť potrebné si premyslieť a uvedieme niektoré výsledné vzťahy, ktoré často potrebujeme pri riešení praktických úloh.

V prvom rade je žiaduce uvedomiť si súvis medzi úlohami riešenými v tejto kapitole a medzi kvalitatívnou diskusiou v 1. kapitole. Väčšina úloh, ktoré sme tu riešili, boli úlohy na hľadanie vlastných hodnôt hamiltoniánu sústavy, a príslušných vlastných funkcií. Pomocou týchto energií a vlastných funkcií môžeme okamžite zapísať stacionárne stavy sústavy odpovedajúce čistým harmonickým kmitom diskutovaným v 1. kapitole.

Ďalej si treba všimnúť na prípade potenciálovej jamy, harmonického oscilátora a atómu vodíka samotný „mechanizmus kvantovania“, t. j. úlohu SchR a podmienky normovateľnosti vlnovej funkcie. Táto podmienka sa vďaka správaniu sa vlnovej funkcie v okolí singulárnych bodov prejaví ako jednoduché okrajové podmienky a tie spolu so SchR vyberú len diskkrétne fyzikálne interpretovateľné stavy.



Pri prechode častice cez potenciálovú bariéru sa treba podrobnejšie zamyslieť nad rozdielom medzi klasickou a kvantovou mechanikou a všimnúť si najmä vzťah typu

$$\psi(x) \sim \exp\left\{-\int \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E]} dx\right\}$$

dávajúci rýchlosť poklesu vlnovej funkcie v oblasti, kde energia častice je menšia ako potenciálna energia.

Teraz uvedieme vlastné funkcie a vlastné hodnoty operátora energie pre lineárny harmonický oscilátor a pre atóm vodíka, ktoré sa často používajú v aplikáciách.

*Lineárny harmonický oscilátor:*

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega_0^2}{2} x^2$$

Rovnica  $H\psi = E\psi$  má normovateľné riešenia len pri hodnotách energie

$$E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

a príslušné vlnové funkcie sú

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) \exp(-\xi^2/2)$$

kde

$$\xi = x/x_0, \quad x_0 = (\hbar/m\omega_0)^{1/2}$$

Moment hybnosti má v kvantovej mechanike výnimočne dôležitú úlohu. Komutačné vzťahy zložiek operátora momentu hybnosti sú

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

Operátor  $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$  komutuje so všetkými tromi operátormi  $L_x, L_y, L_z$ . Zo štvorice  $L_x, L_y, L_z, L^2$  môžeme vybrať dva komutujúce operátory, napr.  $L_z, L^2$ . Ich spoločné vlastné funkcie sú sférické funkcie  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  a platí

$$L^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

$$L_z Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

kde  $l = 0, 1, 2, \dots$  a pri danom  $l$  môže  $m$  nadobúdať hodnoty  $m = -l, -l + 1, \dots, \dots, l - 1, l$ .

Guľové funkcie tvoria úplný ortonormovaný systém na povrchu jednotkovej gule a platí

$$\int d\Omega Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \delta_{l'l} \delta_{mm'}$$

Guľové funkcie s niekoľkými najnižšími hodnotami  $l, m$  sú

$$\begin{aligned} Y_{00}(\vartheta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, & Y_{20}(\vartheta, \varphi) &= \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left( \frac{3}{2} \cos^2 \vartheta - \frac{1}{2} \right) \\ Y_{11}(\vartheta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\varphi}, & Y_{21}(\vartheta, \varphi) &= -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i\varphi} \\ Y_{10}(\vartheta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta, & Y_{22}(\vartheta, \varphi) &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{2i\varphi} \end{aligned}$$

a ďalšie funkcie s  $l = 2, l = 1$  možno získať z predchádzajúcich pomocou vzťahu

$$Y_{l, -m}(\vartheta, \varphi) = (-1)^m Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi)$$

*Atóm vodíka*

Vo sférických súradniciach

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \nabla_{\vartheta, \varphi}^2 \right\} - \frac{e'^2}{r}$$

kde

$$\nabla_{\vartheta, \varphi}^2 = -\frac{1}{\hbar^2} L^2 \quad e'^2 \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

Rovnica  $H\psi = E\psi$  má normovateľné riešenia iba pri hodnotách

$$E_n = -\frac{e'^4}{2\hbar^2 n^2}$$

a príslušné vlastné funkcie sú<sup>86</sup>

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl} Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

<sup>86</sup> Vzhľadom na degeneráciu energetických hladín v atóme vodíka je ľubovoľná lineárna kombinácia  $\sum_{lm} c_{lm} \psi_{nlm}$  vlastnou funkciou hamiltoniánu príslušnou k vlastnej hodnote  $E_n$ .

kde  $n = n_r + l + 1$  a radiálne kvantové číslo nadobúda hodnoty  $n_r = 0, 1, 2, \dots$   
Najnižšie radiálne vlnové funkcie sú:

$$R_{10}(r) = (1/a_1)^{3/2} \cdot 2e^{-r/a_1}$$

$$R_{20}(r) = (1/2a_1)^{3/2} (2 - r/a_1)e^{-r/2a_1}$$

$$R_{21}(r) = (1/2a_1)^{3/2} \frac{r}{a_1\sqrt{3}} e^{-r/2a_1}$$

kde  $a_1 = \hbar^2/me^2$ .

#### 4.14 PRÍKLADY A PROBLÉMY

- Aké sú energetické hladiny elektrónu viazaného
  - vnútri tenkej kovovej vrstvy,
  - vnútri dlhého tenkého kvádra s dĺžkou  $L$  a so štvorcovou základňou dĺžkou  $a$ ,  $L \gg a$ .  
Aproximujte v oboch prípadoch situáciu potenciálovými jamami s nekonečne vysokými stenami. Ktoré excitácie budú dôležité pri nižších teplotách?
- Porovnajte „tunelovacie“ schopnosti elektrónov a protónov. Podmienky „súťaže“ sú takéto: obe častice majú kinetickú energiu 1 eV a dopadajú na potenciálovú bariéru s výškou 2 eV a šírkou rovnou priemeru atómu vodíka. Porovnať treba príslušné koeficienty prechodu.
- Zväzok elektrónov s kinetickou energiou 80 eV letí v kovovej trubici. Elektróny potom vletia do druhej trubice, ktorá má voči prvej potenciál  $-50$  V.
  - Koľko elektrónov sa odrazí naspäť?
  - Odzrazia sa niektoré elektróny naspäť aj vtedy, ak trubica B má potenciál  $+50$  V?
- Pozitron je častica s rovnakou hmotnosťou a opačným nábojom ako elektrón. Elektrón a pozitron môžu vytvoriť nestabilný „atóm“ (pozitronium), podobný atómu vodíka. Zabudnite na chvíľu na otázky nestability a vypočítajte energie stacionárnych stavov pozitronia. Porovnajte so spektrom vodíka. Bude nejaká spektrálna séria pozitronia ležať v oblasti viditeľného svetla?
- $\mu$ -mezón je častica s rovnakým nábojom ako elektrón, ale jeho hmotnosť je asi 207-krát väčšia ako hmotnosť elektrónu.
  - Nájdite energetické hladiny  $\mu$ -mezoatómu vodíka a Bohrov polomer tejto sústavy.
  - Ak sa v ťažších jadrách zachytí  $\mu$ -mezón na jednu z hladín s nízkym hlavným kvantovým číslom  $n$ , potom sa pohybuje tak blízko pri jadre, že tienenie elektrónmi možno zanedbať. Odhadnite energiu  $\gamma$ -kvánt pre  $K_\alpha$ -čiaru v  $\mu$ -mezoatóme cínu (Sn,  $Z = 50$ ).  $K_\alpha$  čiara odpovedá prechodu z hladiny  $n = 2$  na hladinu  $n = 1$ .
- Nájdite vlnové funkcie a vlastné hodnoty energie pre trojrozmerný harmonický oscilátor
  - separáciou premenných v karteziánskych súradniciach,
  - separáciou premenných vo sférických súradniciach.
- Častica sa nachádza v potenciálovej jame  $V(r) = -V_0$ , pre  $r \leq a$  ( $V_0 > 0$ );  $V(r) = 0$  pre  $r > a$ . Nájdite energiu a vlnové funkcie viazaných stavov s momentom hybnosti  $l = 0$ ,  $l = 1$ .
- Častica je viazaná v guli s polomerom  $R$ . Formálne by sme mohli povedať, že sa pohybuje v poli potenciálu  $V(r) = 0$  pre  $r < R$ ,  $V(r) = \infty$  pre  $r > R$ . Nájdite energiu a vlnové funkcie stavov s  $l = 0$  ( $s$ -stavy) a s  $l = 1$  ( $p$ -stavy).

9. Jadro deutéria sa skladá z protónu a z neutrónu. Celkový spin je 1 (v jednotkách  $\hbar$ ), čo znamená, že obidva spiny sú rovnobežné. Orbitálny moment hybnosti je nulový ( $s$ -stav). Interakciu možno približne opísať sféricky symetrickou potenciálnou energiou

$$U(r) = A \exp(-r/a)$$

Nájdite vlnovú funkciu základného stavu.

10. Rovinný rotátor si môžeme predstaviť ako „činku“, ktorej vonkajšie väzby dovoľujú rotovať iba v istej rovine. Takáto fyzikálna sústava je potom charakterizovaná jediným parametrom – momentom zotrvačnosti. Stav rovinného rotátora v klasickej mechanike je daný napríklad vhodným uhlom ako zovšeobecnenou súradnicou a momentom hybnosti ako príslušnou kanonicky združenou veličinou.
- Vyjadrite hamiltonián voľného rovinného rotátora,
  - nájdite spektrum energie.
11. Aké bude rotačné spektrum molekuly HCl, ak vzdialenosť medzi jadrami H a Cl je okolo 0,1 nm?
12. Molekula CO absorbuje (v mikrovlnnej oblasti) žiarenie na čiare s frekvenciou  $\nu = 1,153 \cdot 10^5$  MHz. Tento prechod možno pripísať prechodu z rotačnej hladiny  $s = 1$  na hladinu  $s = 0$ . Určte odtiaľ vzdialenosť medzi jadrom C a jadrom O v molekule CO.
13. V článku 4.4 sme pomocou kvalitatívnych argumentov ukázali, že v jednorozmernej pravouhlej príťažlivej potenciálovej jame existuje vždy aspoň jeden viazaný stav. Zistite podobným spôsobom, či tvrdenie platí aj v 2- a 3-rozmernom prípade.