

33 DYNAMIKA MIKROČÁSTIC

Mikročástice v potenciálové jámě

Tunelový jev

Harmonický oscilátor

Problém mnoha částic v kvantové mechanice

Mikročástice se při svém pohybu vyznačují mnoha zvláštnostmi, které pomocí klasické fyziky nelze vysvětlit a jsou často v přímém rozporu se "zdravým" rozumem. Tyto zvláštnosti však vyplývají úplně přirozeně ze Schrödingerovy rovnice, a co je nejdůležitější, jsou v dokonalém souhlase s experimentem. Triviálním případem je pohyb úplně volné částice. Jelikož na ni nepůsobí vnější síla, je $W_p = \text{konst.}$, což při vhodné volbě vztažné soustavy přejde na $W_p = 0$, a řešení rovnice (31.2) - např. pro částici pohybující se ve směru osy $+x$ můžeme vyjádřit ve tvaru

$$\psi = A e^{\left[\frac{j}{\hbar} (2mW)^{\frac{1}{2}} x \right]},$$

V případě volné částice nemáme žádné omezující podmínky, proto i energie W vystupující v této funkci může mít libovolnou hodnotu. Hybnost volné částice vyplývá z rovnice $p_x \psi = -j \hbar \partial \psi / \partial x$, takže po dosazení vlnové funkce dostaneme rovnici

$$p_x \psi = - (j \hbar) \frac{j}{\hbar} (2mW)^{\frac{1}{2}} \psi,$$

z které vyplývá očekávaný výsledek

$$p_x = (2mW)^{\frac{1}{2}}.$$

Hybnost volné částice je tedy přesně určena, avšak hustota pravděpodobnosti výskytu částice úměrná výrazu $\psi \psi^* = A^2$ je konstantní na celé ose x . Volná částice je tedy současně přítomná na ose x od $-\infty$ do $+\infty$. Je to v souladu s Heisenbergovým principem neurčitosti ($\Delta p = 0$, $\Delta x \rightarrow \infty$), současně však poukazuje na to, že pohyb úplně volné částice s přesně definovanou hybností je nereálný fyzikální proces. Reálným se stane tehdy, jestliže připustíme určitou "rozmazanost" hybnosti Δp . V takovém případě je její pohyb popsán vlnovým klubkem (30.7), které rovněž vyhovuje Schrödingerově rovnici a dovoluje její lokalizaci na konečný interval Δx .

Vzhledem k malému praktickému významu pohybu volné částice nebudeme se již dále touto otázkou

zabývat a přejdeme na zkoumání dynamiky částic za působení potenciálových polí.

33.1 Mikročástice v potenciálové jámě

Velmi ilustrativním příkladem zvláštností při pohybu mikročástic je jejich pohyb v tzv. potenciálové jámě. Je to prostor, ve kterém má částice menší potenciální energii, než mimo něj. Příkladem potenciálové jámy může být prostor mezi dvěma vrstvami elektrického náboje (obr. 33.1), elementární částice v jádře, elektron v kovu apod. Pro jednoduchost si podrobněji všimněme případu nekonečně hluboké pravoúhlé jednorozměrné potenciálové jámy (obr. 33.2) a případu průchodu elektronu potenciálovou stěnou konečné výšky (věty 33.1 a 33.2).

33.1

Celková energie částice v nekonečně hluboké potenciálové jámě je kvantovaná a je určena vztahem

$$W = \frac{h^2}{8ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (33.1)$$

kde a je šířka potenciálové jámy a m je hmotnost částice.

33.2

Mikročástice s celkovou energií W menší než je výška potenciálové bariéry W_{po} může proniknout do prostoru potenciálového pole. Hustota pravděpodobnosti výskytu částice v této oblasti ve vzdálenosti x od rozhraní je určena vztahem

$$p = \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} [2m(W_{po} - W)]^{\frac{1}{2}} x \right\}. \quad (33.2)$$

Matematicky definujeme nekonečnou potenciálovou jámu podmínkami (obr. 33.2).

$$\begin{aligned} -\infty < x \leq 0, & \quad W_p \Rightarrow \infty, \\ 0 < x < a, & \quad W_p = 0, \\ a \leq x < \infty, & \quad W_p \Rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (33.3)$$

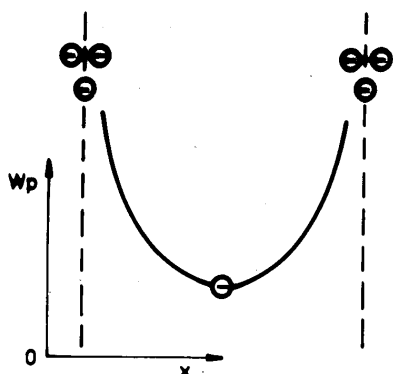
Jelikož jsme položili $W_p=0$, má Schrödingerova rovnice pro oblast potenciálové jámy tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = W \psi \quad (33.4)$$

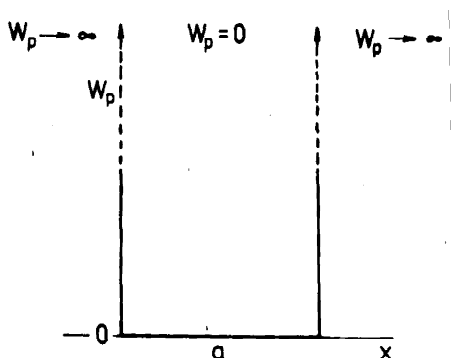
a její řešení je určeno funkcí

$$\begin{aligned} \psi &= A e^{\frac{j}{\hbar} px} + B e^{-\frac{j}{\hbar} px}, \\ p &= (2mW)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (33.5)$$

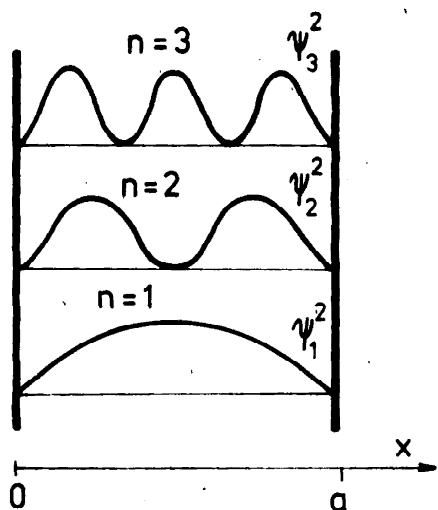
Potenciálové stěny jsou nekonečně vysoké, proto pravděpodobnosti výskytu mikročástice na hranicích potenciálové jámy jsou rovny nule, což můžeme vyjádřit podmínkami



Obr. 33.1 Příklad reálné potenciálové jámy



Obr. 33.2 Nekonečně hluboká pravoúhlá potenciálová jáma

Obr. 33.3 Rozložení hustoty pravděpodobnosti výskytu částice v potenciálové jámě pro nejnižší dovolené stavy $n=1, 2, 3$

$$\psi(0) = 0 \quad \psi(a) = 0. \quad (33.6)$$

Prvou z nich splníme volbou $B=-A$, takže řešení (33.5) můžeme napsat ve tvaru

$$\begin{aligned} \psi &= A \left(e^{\frac{j}{\hbar} px} - e^{-\frac{j}{\hbar} px} \right) = \\ &= A \left(\cos \frac{px}{\hbar} + j \sin \frac{px}{\hbar} - \cos \frac{px}{\hbar} + j \sin \frac{px}{\hbar} \right) = \\ &= 2jA \sin \frac{px}{\hbar}. \end{aligned} \quad (33.7)$$

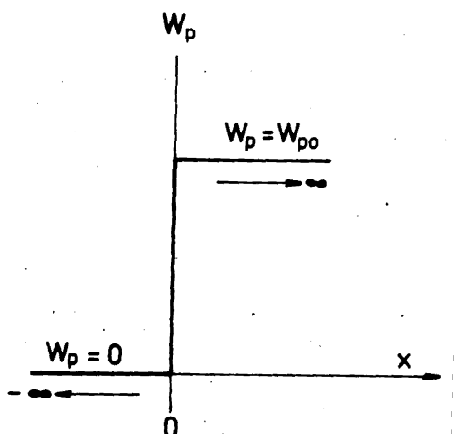
Druhou podmínku (33.6) splníme tak, že požadujeme splnění rovnice $\sin pa/\hbar=0$. Vyhovují jí řešení splňující podmínku

$$\frac{pa}{\hbar} = \frac{a}{\hbar} (2mW)^{\frac{1}{2}} n\pi, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (33.8)$$

Z této rovnice vyplývá, že energie mikročástice W může nabýt jen určité diskrétní hodnoty určené vztahem (33.1). Rozdíl mezi prvými dvěma energetickými hladinami je

$$\Delta W = \frac{3}{8} \frac{h^2}{ma^2}.$$

Pro elektron s hmotností $m \doteq 10^{-30}$ kg v potenciálové jámě šířky rovnající se meziatomové vzdálenosti v krystalech ($a \doteq 0,3$ nm) je tato energie



Obr. 33.4 Rozhraní dvou potenciálových polí

přibližně $\Delta W \approx 13 \text{ eV}$. Pro makroskopické částice (např. balon s hmotností $m=0,1 \text{ kg}$ se vzdáleností mezi stěnami $a=0,1 \text{ m}$) je tato energie přibližně $\Delta W \approx 10^{-45} \text{ eV}$, takže hovořit o kvantování energie nemá v tomto případě smysl.

Na tomto jednoduchém příkladě si ukážeme, jak je možno normovat vlnovou funkci a najít pravděpodobnost výskytu částice. Pravděpodobnost, že se částice nachází někde v potenciálové jámě je rovna 1. Proto podmínka normovanosti vlnové funkce (30.10) má v tomto případě tvar

$$\int_0^a \psi \psi^* dx = 1.$$

(33.9)

Dosazením funkce (33.7) do této rovnice dostaneme vztah

$$4A^2 \int_0^a \sin^2 \left(\frac{px}{\hbar} \right) dx = 4A^2 \int_0^a \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos \frac{2px}{\hbar} \right) dx = 2aA^2 = 1,$$

(33.10)

protože platí

$$\int_0^a \cos \left(\frac{2px}{\hbar} \right) dx = \frac{\hbar}{2p} \left[\sin \frac{2px}{\hbar} \right]_0^a = \frac{\hbar}{2p} (\sin 2n\pi - \sin 0) = 0.$$

Hustota pravděpodobnosti výskytu částice tedy bude

$$\Psi \Psi^* = \frac{2}{a} \sin^2 \left(\frac{px}{\hbar} \right) = \frac{2}{a} \sin^2 \left(\frac{n\pi}{a} x \right), \quad (33.11)$$

kde jsme použili vyjádření dovolených hodnot hybností (33.8). Vidíme, že částice se nevyskytují se stejnou pravděpodobností uvnitř potenciálové jámy. Hustota pravděpodobnosti je pro daný kvantový stav vyjádřený číslem n funkcí souřadnice x . Při stěnách $x=0$ a $x=a$ je tato hustota pravděpodobnosti rovna nule. Pro prvé tři energetické hladiny je rozložení hustoty pravděpodobnosti výskytu částice znázorněno na obr. 33.3.

Při výpočtu hybnosti částice podle vztahu (31.19) s využitím vlnové funkce (33.5) musíme mít na zřeteli, že prvá část vlnové funkce charakterizuje částice pohybující se v opačném směru osy $+x$, druhá částice pohybující se v opačném směru. Do vztahu (31.19) proto musíme dosadit jen jednu nebo druhou funkci. Dostaneme výsledek $p=(2m W)^{1/2}$. Jestliže bychom dosadili celkovou funkci (33.5), vyjde nám $p=0$, jak je možno se přesvědčit dosazením. Je to správné, protože střední hodnota veličin $p=(2m W)^{1/2}$ a $p=-(2m W)^{1/2}$ se skutečně rovná nule.

Jestliže přejdeme k reálnému případu potenciálového pole, ve kterém nejsou bariéry nekonečně veliké zjistíme zajímavý - z hlediska klasické fyziky nepochopitelný - jev, že totiž částice s menší energií než je výška bariéry se mohou dostat do oblasti bariéry. Jestliže pak má bariéra jen konečnou tloušťku existuje konečná pravděpodobnost proniknutí částice touto bariérou (obr. 33.4). Za účelem důkazu tohoto jevu uvažujeme o případě jednoduchého rozhraní dvou potenciálových polí - jednoho ve kterém je potenciální energie částice rovna nule $W_p=0$, druhého s potenciální energií $W_p=W_{po}$ (obr. 33.4). V prvním poli platí rovnice (33.4) s řešením (33.5), které označíme jako Ψ_1 , ve druhém poli má Schrödingerova rovnice tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_2}{dx^2} = (W - W_{po}) \Psi_2. \quad (33.12)$$

Její řešením je funkce

$$\Psi_2 = A_2 e^{\frac{j p' x}{\hbar}} + B_2 e^{-\frac{j p' x}{\hbar}}, \quad p' = [2m(W - W_{po})]^{1/2}. \quad (33.13)$$

Pro nás je zajímavý případ, ve kterém je $W < W_{po}$, tj. částice má menší energii než je výška potenciálové bariéry. Je proto možno psát $p' = j[2m(W_{po} - W)]^{1/2} = j p_2$, kde p_2 je reálná veličina. Funkce (33.13) přejde do tvaru

$$\Psi_2 = A_2 e^{-\frac{p_2 x}{\hbar}} + B_2 e^{\frac{p_2 x}{\hbar}}. \quad (33.14)$$

Ze standardních podmínek (věta 31.3) vyplývá, že na rozhraní ($x=0$) musí být vlnová funkce ψ_1 a ψ_2 a jejich derivace spojité

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \quad (33.15)$$

$$\left. \frac{d\psi_1}{dx} \right| = \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right| \quad (33.16)$$

a kromě toho podmínky konečnosti vlnové funkce vyplývá, že pro $x \rightarrow \infty$ musí být ψ_2 konečná. Tuto podmínku splníme volbou $B_2=0$. Podmínky (33.15) a (33.16) nám potom umožní vypočítat podíly B_1/A_1 resp. A_2/A_1 . Na tomto místě si znovu připomeňme, že prvá část vlnové funkce ψ_1 charakterizuje částice pohybující se opačným směrem, tj. částice odražené od této bariéry. Funkce ψ_2

$$\psi_2 = A_2 e^{-\frac{1}{\hbar}(p_2 x)} \quad (33.17)$$

popisuje částice pohybující se dovnitř potenciálového pole (energie W_{po}). Nalezením podílů $(B_1/A_1)^2$ můžeme tak nalézt poměr pravděpodobností výskytu částic v jednotlivých situacích, tj. částic odražených od potenciálové bariéry, resp. část těch, které vnikly do bariéry. Jelikož odraz částic s menší energií od potenciálové bariéry s větší energií je přirozeným jevem, soustředíme se jen na částice, které vnikají dovnitř potenciálového pole. Pravděpodobnost jejich vniku najdeme aniž bychom museli hledat hodnoty konstant A_1 , B_1 a A_2 . Počet těch částic, které se na rozhraní $x=0$ "ocitly" se směrem postupu do potenciálového pole bariéry určuje zřejmě výraz $\psi_2^*(x) \psi_2(x)$, proto jejich podíl, neboli pravděpodobnost vniku do bariéry je s ohledem na tvar funkce (33.17) vyjádřena vztahem

$$P(x) = \frac{\psi_2^*(x) \psi_2(x)}{\psi_2^*(0) \psi_2(0)} = e^{\left\{ \frac{2}{\hbar} [2m(W_{po} - W)]^{\frac{1}{2}} x \right\}}, \quad (33.18)$$

což je vztah (33.2). Vidíme, že v reálných podmínkách se tato pravděpodobnost nikdy nerovná nule, což značí, že i částice s malou energií mají určitou pravděpodobnost průniku do oblasti potenciálového pole bariéry charakterizované větší potenciální energií. Tato pravděpodobnost se však významně liší od nuly jen v mikroskopických podmínkách. Např. pro elektrony ($m \approx 10^{-30}$ kg) při rozdílu energií $W_{po} - W = 1$ eV (které jsou běžné např. na kontaktech) je pravděpodobnost výskytu vzdálenosti $x=0,1$ nm asi $p=0,6$, ve vzdálenosti $0,3$ nm je $P=0,1$ a ve vzdálenosti $x=1$ nm již jen $P=0,003$.

Je možno lehce ukázat, že existuje i od nuly různá pravděpodobnost, že se částice odrazí od stěny i tehdy, jestliže má větší energii, než je potenciální energie bariéry. Z hlediska klasické fyziky je každá překážka pro částici buď neprostupná, nebo prostupná, v kvantové fyzice každá překážka částice částečně odráží a částečně propouští.

33.2 Tunelový jev

Již v předcházejícím článku jsme se dozvěděli, že reálná potenciálová bariéra nemůže zabránit tomu, aby část mikročástic vnikla do oblasti bariéry. Můžeme proto očekávat, že jestliže oblast potenciálového pole bude dostatečně úzká, mohou se částice bariérou dostat na druhou stranu, i když mají menší energii než je potenciální energie bariéry. Tento jev se podobá překonání kopce vlakem průjezdem tunelu, proto se uvedený jev nazývá obecně tunelovým jevem. V současné elektronice se široce využívá, proto se jím budeme podrobněji zabývat (věty 33.3 a 33.4).

33.3

Pravděpodobnost průchodu částic pravouhloú potenciálovou bariérou výšky W_{po} a šířky d je určena vztahem

$$p = e^{-\left\{ \frac{2}{\hbar} [2m(W_{po} - W)]^{\frac{1}{2}} d \right\}}, \quad (33.19)$$

kde m je hmotnost částic a W jejich celková energie.

33.4

Pravděpodobnost průchodu částic bariérou obecného tvaru $W_p(x)$ tloušťky d je

$$P = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_0^d \{2m[W_p(x) - W]\}^{\frac{1}{2}} dx}. \quad (33.20)$$

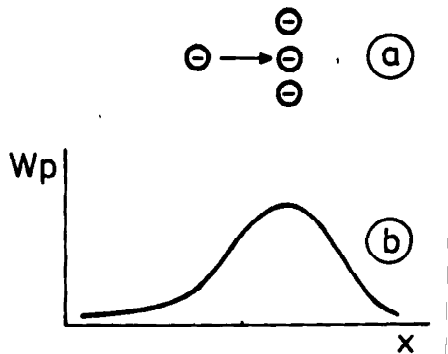
Potenciálové bariéry vznikají nahromaděním elektrického náboje jednoho znaménka. Potenciální energie elektronu při průchodu vrstvou záporného náboje (obr. 33.5) se mění tak, jak je vyznačeno na obrázku. Idealizací takové obecné bariéry vytváříme si představu tzv. obdélníkové potenciální bariéry matematicky definované podmínkami

$$\begin{aligned} -\infty < x < 0, & \quad W_p = 0(1) \\ 0 \leq x \leq d, & \quad W_p = W_{po}(2) \\ d < x < \infty, & \quad W_p = 0(3) \end{aligned}$$

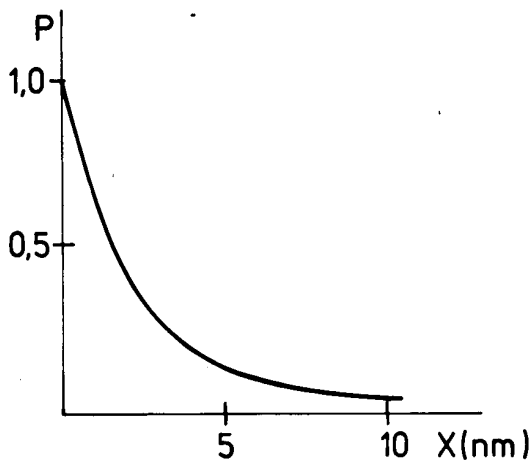
(33.21)

které nám slouží jako model obecnějších potenciálových bariér, na které můžeme ilustrovat zvláštnosti tunelového jevu.

V oblasti 1 a 3 má Schrödingerova rovnice tvar (33.4) a řešení



Obr. 33.5 Potenciálová bariéra elektronu tvořená vrstvou záporného náboje



Obr. 33.6 Pravděpodobnost tunelového jevu elektronu jako funkce šířky bariéry pro $W_{po} - W = 0.01$ eV

$$\psi_1 = A_1 e^{\frac{j}{\hbar} px} + B_1 e^{-\frac{j}{\hbar} px},$$

$$p = (2mW)^{\frac{1}{2}}$$

(33.22)

$$\psi_3 = A_3 e^{\frac{j}{\hbar} px} + B_3 e^{-\frac{j}{\hbar} px},$$

(33.23)

a v oblasti 2 tvar (33.12) s řešením

$$\psi_2 = A_2 e^{\frac{j}{\hbar} p'x} + B_2 e^{-\frac{j}{\hbar} p'x},$$

$$p' = [2m(W - W_{po})]^{\frac{1}{2}}$$

(33.24)

Podobně jako v předcházejícím případě (podmínky /33.15/ a /33.16/) musí i zde platit podmínky

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \quad \psi_2(d) = \psi_3(d)$$

$$\frac{d\psi_1}{dx} \Big|_0 = \frac{d\psi_2}{dx} \Big|_0, \quad \frac{d\psi_2}{dx} \Big|_d = \frac{d\psi_3}{dx} \Big|_d.$$

(33.25)

S použitím funkcí (33.22) - (33.25) dostaneme za těchto podmínek rovnice

$$\begin{aligned}
A_1 + B_1 &= A_2 + B_2, \\
p(A_1 - B_1) &= p'(A_2 - B_2), \\
A_2 e^{\frac{j}{\hbar} p' d} + B_2 e^{-\frac{j}{\hbar} p' d} &= A_3 e^{\frac{j}{\hbar} p d} + B_3 e^{-\frac{j}{\hbar} p d}, \\
p' \left[A_2 e^{\frac{j}{\hbar} p' d} - B_2 e^{-\frac{j}{\hbar} p' d} \right] &= p \left[A_3 e^{\frac{j}{\hbar} p d} - B_3 e^{-\frac{j}{\hbar} p d} \right].
\end{aligned}
\tag{33.26}$$

Jsou to čtyři rovnice pro šest konstant. Konstanta B_3 však charakterizuje částice, které se vracejí k bariéře z pravé strany. Tok částic má směr osy x , proto není důvodu předpokládat, že by se v oblasti 3 nacházely částice s opačně orientovanou rychlostí. Konstanta B_3 se proto rovná nule. Konstanta A_1 charakterizující proud částic k bariéře je úměrná intenzitě toku částic. Ostatní čtyři konstanty můžeme vypočítat z rovnic (33.26).

$$P = \frac{B_2 B_2^*}{A_1 A_1^*} = \frac{4}{1 + \left(\frac{W_{po} - W}{2W} \right)^2} e^{-\left\{ \frac{2}{\hbar} [2m(W_{po} - W)]^{\frac{1}{2}} d \right\}}.
\tag{33.27}$$

Řešení je však

Jelikož $W_{po} > W$ a při energiích W_{po} několikrát převyšující celkovou energii částic je již pravděpodobnost průniku bariéry zanedbatelně malá, předexponenciální faktor má v reálných případech hodnotu blízkou k 1, proto vztah (33.27) používáme ve tvaru (33.19). K odvození uvedeného vztahu však nepotřebujeme řešit složitý systém rovnic (33.26). Pravděpodobnost vniku částic do potenciálového pole (33.18) určuje pravděpodobnost, že částici najdeme v hloubce x za rozhraním. Jestliže v této vzdálenosti potenciálovou bariéru ukončíme, octnou se tyto částice za potenciálovou bariérou, takže jestliže do vztahu (33.18) dosadíme $x=d$, dostaneme přibližnou pravděpodobnost průniku bariérou hloubky d . Na obr. 33.6 je vynesena závislost pravděpodobnosti průniku elektronů potenciálovou bariérou různé šířky tunelovým jevem. Vidíme, že bariéry o tloušťce rovnající se několika desetinám nm, což je přibližně meziatomová vzdálenost v krystalech, jsou pro elektrony prakticky průzračné, zatímco bariéry o tloušťce větší jako několik desítek nm jsou již téměř úplně nepropustné. Tento výsledek nejen že vysvětluje mnoho z hlediska klasické fyziky nepochopitelných jevů (např. jevy na kontaktech,

usměrňovací jev, činnost tzv. Tunelové diody), ale se i prakticky využívají.

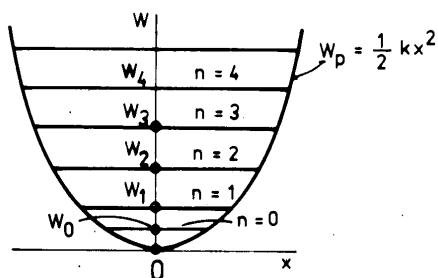
33.3 Harmonický oscilátor

Víme již, že podstatou vnitřní energie je jednak chaotický pohyb volných atomů a molekul plynu a kmitavý pohyb atomů a molekul pevné látky a kapalin. Tyto částice, které jsou v pevné látce vázány k určitým rovnovážným polohám, podléhají při svém vychýlení z uvedených poloh silám, které jsou v prvním přiblížení přímo úměrné výchylkám. Podle věty 23.1 můžeme je tedy považovat za harmonické oscilátory. Podle výsledků odvozených v článku 23.1 mohou mít takové oscilátory libovolnou energii. Tento závěr je však neslučitelný s Planckovým postulátem, podle kterého se energie v dutině absolutně černého tělesa skládá z nedělitelných kvant energie o velikosti $h\nu$. Bylo by proto přirozené předpokládat, že energie harmonického oscilátoru může obecně nabývat jen energii rovnající se celočíselnému násobku kvanta $h\nu$, kde ν je jeho kmitočet. V tomto článku ukážeme, že tento, z hlediska klasické fyziky ničím nepodložený požadavek, se stává zcela přirozeným, jestliže pohyb harmonického oscilátoru řešíme pomocí kvantové mechaniky (věta 33.5).

33.5

Energie harmonického oscilátoru je kvantována podle vztahu

$$W = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad \text{kde } n = 0, 1, 2, 3 \dots \quad (33.28)$$



obr. 33.7 Energetické spektrum kvantového harmonického oscilátoru

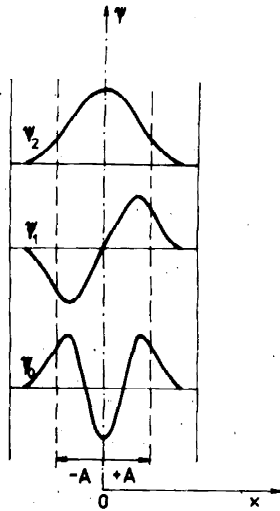
Potenciální energie harmonického oscilátoru pohybujícího se v ose x je podle vztahu (23.11) vyjádřena funkcí

$$W_p = \frac{1}{2} kx^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 = 2\pi^2 m\nu^2 x^2. \quad (33.29)$$

Schrödingerova rovnice popisující pohyb harmonického oscilátoru má proto tvar

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (W - 2\pi^2 m\nu^2 x^2) = 0. \quad (33.30)$$

Není jednoduché najít přímo řešení takové rovnice, které vyhovuje podmínkám, kladeným na vlnovou funkci (věta 31.3). Zavedme označení



Obr. 33.8 Vlnové funkce harmonického oscilátoru pro prvé tři kvantové stavy

$$u = \left(\frac{2\pi m\nu}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} x. \quad (33.31)$$

Pro prvou, resp. druhou derivaci vlnové funkce podle x-ové souřadnice dostaneme potom vztahy

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d\psi}{du} \frac{du}{dx}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{d^2\psi}{du^2} \left(\frac{du}{dx} \right)^2 = 2\pi \frac{m\nu}{\hbar} \frac{d^2\psi}{du^2}. \quad (33.32)$$

Jestliže toto vyjádření dosadíme do rovnice (33.30), dostaneme

$$\frac{2\pi m\nu}{\hbar} \frac{d^2\psi}{du^2} + \frac{2\pi m\nu}{\hbar} \left(\frac{2W}{h\nu} - \frac{2\pi m\nu}{\hbar} x^2 \right) \psi = 0. \quad (33.33)$$

Poslední člen v závorce je proměnná u^2 a označíme-li člen před ním symbolem A

$$A = \frac{2W}{h\nu} \quad (33.34)$$

můžeme rovnici (33.33) napsat v zjednodušeném tvaru

$$\frac{d^2\psi}{du^2} + (A - u^2)\psi = 0. \quad (33.35)$$

Hledejme řešení této rovnice. Zkusme nejprve řešení ve tvaru

$$\psi_o = C_o e^{-\frac{u^2}{2}}. \quad (33.36)$$

Prvá derivace této funkce je $d\psi_o/du = -u\psi_o$ a druhá derivace zase funkce

$$\frac{d^2\psi_o}{du^2} - \psi_o + u^2\psi_o = (u^2 - 1)\psi_o \quad (33.37)$$

Vidíme, že tato rovnice se ztotožní s rovnicí (33.35), jestliže položíme $A=1$, tj. podle vztahu (33.34)

$$W_o = \frac{1}{2} h\nu. \quad (33.38)$$

Funkce (33.36) je tedy řešením diferenciální rovnice harmonického oscilátoru (33.35), vyhovuje jí jeho energie podmínce (33.38). Podobným postupem dokážeme, že i funkce

$$\psi_1 = 2 C_1 u e^{-\frac{u^2}{2}} \quad (33.39)$$

je řešením rovnice (33.35), protože platí postupně

$$\frac{d\psi_1}{du} = 2C_1 \left(e^{-\frac{u^2}{2}} - u^2 e^{-\frac{u^2}{2}} \right)$$

a dále

$$\frac{d^2\psi_1}{du^2} = 2C_1 \left(-u e^{-\frac{u^2}{2}} - 2u e^{-\frac{u^2}{2}} + u^3 e^{-\frac{u^2}{2}} \right) = \psi_1(u^2 - 3).$$

jelikož v tomto případě je $A=3$, energie harmonického oscilátoru musí podle vztahu (33.34) splňovat podmínku

$$W_1 = 3 \frac{h\nu}{2} = \frac{1}{2} h\nu + h\nu = W_o + h\nu. \quad (33.40)$$

takto bychom postupně dokázali, že všechny funkce typu

$$\Psi_n = C_n \left[(-1)^n \cdot e^{u^2} \cdot \frac{d^n (e^{-u^2})}{du^n} \right] e^{-\frac{u^2}{2}} \quad (33.41)$$

vyhovují diferenciální rovnici (33.35), přičemž energie harmonického oscilátoru musí splňovat podmínku

$$W_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) h \nu = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega .$$

Tím jsme dokázali, že energie harmonického oscilátoru je skutečně kvantovaná podle vztahu (33.28). Jeho energetické spektrum je znázorněno na obr. 33.7.

V případě makroskopických harmonických oscilátorů je kvantovost určena vztahem (33.28) zanedbatelná, protože i při relativně vysokých kmitočtech $\nu \approx 10^3 \text{ Hz}$ jsou rozdíly mezi jednotlivými hladinami energie řádu 10^{-32} J , což při energiích kmitajících makroskopických těles neměřitelné hodnoty. Jak jsme již poukázali na několika místech můžeme i v případě harmonického oscilátoru konstatovat, že kvantovost nemá v makrofyzičce žádný význam a že tedy makroskopický harmonický oscilátor může nabývat prakticky všechny možné energie vyplývající z klasického vztahu (23.3).

Jiná je situace v mikrosvětě. Tam se většinou realizují stavy s nízkými kvantovými čísly ($n=1, 2, 3\dots$), takže rozdíl mezi jednotlivými dovolenými energiemi je stejného řádu jako samotná energie kmitajících částic.

Určitým nečekaným překvapením vyplývajícím z kvantověmechanického řešení problému harmonického oscilátoru je existence stavů charakterizovaných energií $h\nu/2$. Jelikož k vnitřní energii přispívají jen kvanta $h\nu$, musíme předpokládat, že kmity charakterizované energiemi $h\nu/2$ nevymizí ani při poklesu teploty k absolutní nule. Nazýváme je proto nulovými kmity. Jejich úloha a význam v mikrosvětě nejsou doposud uspokojivě objasněny. Zdá se, že jejich existence se zřetelně projevuje při tuhnutí helia.

Na závěr ještě připomeňme, že funkce v hranaté závorce (33.41) se v matematice uvádí pod jménem Hermitovy polynomy. Grafický obraz prvních tří funkcí (33.41) poskytuje obr. 33.8. Na obr. je vždy vyznačena oblast (+A) v níž by se měla výhradně vyskytovat částice kmitající "klasicky" se stejnou celkovou energií W_n .

HERMITE Charles (ermit), 1822-1901, francouzský matematik. Dosáhl významných výsledků ve více oblastech matematiky. Ve fyzice je znám svými polynomy nazvanými jeho jménem.

33.4 Problém mnoha částic v kvantové mechanice

Podobně jako se v klasické mechanice formulují impulzové (a jiné) věty pro systémy částic, můžeme i v kvantové mechanice formulovat problém pro systém složený z několika, resp. z velkého počtu částic, které na sebe vzájemně působí. Pro takový obecný případ můžeme Schrödingerovu rovnici napsat formálně ve tvaru

$$\sum_i \hat{H}_i \psi = W \psi,$$

kde

$$\sum_i \hat{H}_i = \sum_i \left(\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i + W_{\pi} \right),$$

(33.42)

je operátor celkové kinetické a potenciální energie všech částic tvořících systém a W je celková energie. Prakticky není možno najít exaktní řešení takové rovnice, proto se uchylujeme k rozličným aproximacím a speciálním metodám. Avšak i bez toho, abychom tuto rovnici řešili, můžeme zjistit několik důležitých informací o systému částic na základě celkem obecných úvah (věty 33.6 až 33.8).

výsledná funkce charakterizující soubor částic byla např. antisymetrická, musíme vytvořit speciální kombinaci jednotlivých funkcí. Např. pr 33.6

Vlnová funkce popisující systém stejných částic, která při záměně dvou částic nezmění své znaménko, tj. funkce

$$\Psi (...i, j, ...) = \Psi (...j, i, ...) \quad (33.43)$$

se nazývá symetrická vlnová funkce. Funkce tohoto typu popisují částice s nulovým nebo celočíselným spinem (tzv. bozony). Takový systém částic podléhá Boseově-Einsteinově statistice.

33.7

Vlnová funkce popisující systém částic, která při záměně dvou částic změní své znaménko na obrácené, tj. funkce

$$\Psi (...i, j, ...) = -\Psi (...j, i, ...) \quad (33.44)$$

se nazývá antisymetrická. Takové funkce popisují

Uvažujme o systému částic označených např. písmeny a, b, c, ...i, j... (obr. 33.9). Jejich stav popisuje j kvantové mechanice vlnová funkce a, b, c, ...i, j... a pravděpodobnost, že v objemové jednotce najdeme systém s určitým rozložením částic je určena součinem $\Psi^*(a, b, c, \dots i, j, \dots) \Psi(a, b, c, \dots i, j, \dots)$. Jestliže se jedná o systém identických, tj. vzájemně nerozlišitelných částic, tato pravděpodobnost se při záměně dvou částic, např. i-té a j-té nemůže změnit, proto musí platit rovnice

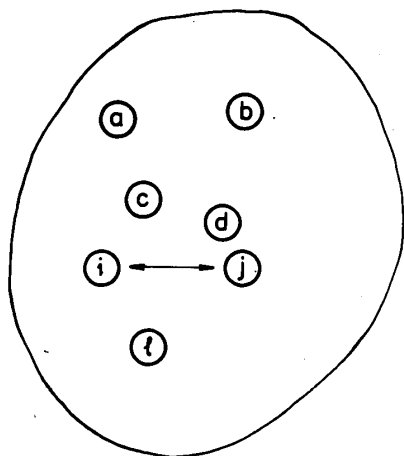
$$\begin{aligned} \Psi^*(...i, j, ...) \Psi(...i, j, ...) &= \\ &= \Psi^*(...j, i, ...) \Psi(...j, i, ...) \end{aligned} \quad (33.45)$$

Tuto rovnici můžeme splnit dvojím způsobem: buď předpokládáme, že znaménko vlnové funkce se při záměně částic nemění, nebo se změní na opačné, tj. $\Psi(...i, j, ...) = \Psi(...j, i, ...)$ symetrická funkce nebo $\Psi(...i, j, ...) = -\Psi(...j, i, ...)$ antisymetrická funkce. Ukázalo se, že tato na první pohled téměř bezvýznamná skutečnost, má v přírodě hluboký smysl. Odráží vlastnosti dvou možných skupin částic, jedné s nulovým, resp. celočíselným spinem, druhé s polovičním spinem. Podle

částice s polovičním spinem (tzv. fermiony). Takový systém částic podléhá Fermiově-Diracově statistice.

33.8

Pro částice popsané antisymetrickou funkcí (fermiony) platí Paulův vylučovací princip: v určitém kvantovém stavu se může nacházet nejvíce jedna částice.



Obr. 33.9 Soustava označených částic

KVANTOVÝ STAV	→	
	1	2
a	⊖	⊖
b	⊖	
c		
d		⊖
e	⊖	

Obr. 33.10 Obsazování kvantových stavů fermiony podle Pauliho vylučovacího principu

tabulky ve článku 32.2 k prvému typu patří např. fotony, některé základní částice a složené částice, skládající se ze sudého počtu základních částic, k druhé skupině patří většina základních částic, např. elektron, proton, neutron atd.

Obráceně můžeme tvrdit, že systém částic s nulovým nebo celočíselným spinem musí být popsán symetrickou funkcí a systém částic s polovičním spinem antisymetrickou funkcí. Každý součet, resp. součin vlnových funkcí popisujících chování každé individuální částice představuje symetrickou funkci. Jestliže však chceme, aby o dvě částice a, b , které se mohou nacházet ve stavech popsaných vlnovými funkcemi ψ_1 a ψ_2 je takovou kombinací funkce

$$\psi(a, b) = \psi_1(a) \psi_2(b) - \psi_2(a) \psi_1(b). \quad (33.46)$$

Jestliže zaměníme částici a za částici b a naopak, skutečně dostaneme výsledek $\psi(b, a) = -\psi(a, b)$. Z tohoto zápisu vyplývá však ještě jedna velmi důležitá vlastnost. Jestliže bychom chtěli popsat stav dvou identických částic nacházejících se ve stejném kvantovém stavu $\psi_1 = \psi_2 = \psi$, dostali bychom funkci

$$\psi(b, b) = \psi(b) \psi(b) - \psi(b) \psi(b) = 0 \quad (33.47)$$

Jestliže neexistuje vlnová funkce, která by popisovala daný kvantový stav, znamená to, že takový stav se nemůže realizovat. Rovnici (33.47) můžeme proto interpretovat tak, že v určitém kvantovém stavu se mohou nacházet jen jedna nebo žádná částice s polovičním spinem (obr. 33.10).

PAULI WOLFGANG, 1900-1958, švýcarský teoretický fyzik. Po skončení studia v Mnichově pracoval v Göttingenu a na známém Bohrově ústavu teoretické fyziky v Kodani. R. 1928 přijal profesuru v Zürichu. Okruh jeho zájmů byl velmi široký; Struktura atomu, jaderné síly, teorie relativity, kvantová mechanika, elementární částice.

Jeho práce se vyznačovaly hlubokým fyzikálním rozbořením problému a vysokou matematickou úrovní. Vylučovací princip po něm pojmenovaný a vztah mezi spinem a statistikou částic představují nejznámější z jeho prací.

Nobelova cena za fyziku, která mu byla udělena r. 1945 dokumentuje význam jeho podílu na rozvoji teoretické fyziky 20. století.

Tím jsme přirozeným způsobem objasnili tzv. Pauliův princip (věta 33.8), který má v přírodě velký význam.

V 9. kapitole jsme ukázali, že pro takové částice, které zaplňují jednotlivé buňky fázového prostoru tak, že v každé buňce je jen jedna nebo žádná částice, platí Fermiova-Diracova statistika. Pro částice s polovičním spinem musíme tedy používat Fermiovu-Diracovu rozdělovací funkci. Nazýváme je proto fermiony. Ostatní částice jsou popsány symetrickou vlnovou funkcí. V takových případech Pauliův vylučovací princip neplatí a pro systém částic je třeba používat Boseovu-Einsteinovu statistiku. Takové částice nazýváme proto bozony.

Požadavek antisymetričnosti pro větší počet částic splníme jednoduše tak, že výslednou funkci vyjádříme ve tvaru determinantu

$$\Psi = \begin{vmatrix} \psi_1^{(a)} & \psi_2^{(a)} & \psi_3^{(a)} & \dots \\ \psi_1^{(b)} & \psi_2^{(b)} & \psi_3^{(b)} & \dots \\ \psi_1^{(c)} & \psi_2^{(c)} & \psi_3^{(c)} & \dots \end{vmatrix}$$

(33.48)

Při záměně jedné částice druhou se vymění řádka determinantu a to, jak víme z matematiky, má za následek změnu znaménka determinantu. Jestliže však dáme dvě částice do stejných stavů, dostaneme determinant se dvěma stejnými řádky, což má za následek, že hodnota determinantu se rovná nule. Tak se automaticky zabezpečí splnění Pauliho vylučovacího principu.

Výsledky odvozené v tomto článku jsou velmi důležité při řešení problémů atomů s více elektrony, problémů chemických vazeb a systémů elektronů v pevných látkách.