Cvičení 21. 3. 2023

Bariéra

Na přednášce jste viděli, že je nenulová pravděpodobnost, že částice se vyskytne v místech, kde je potenciál větší, než je její energie. Tedy pokud není potenciál nekonečný. Zopakujeme si nyní, jaké je řešení pro případ konstantního potenciálu. Nejprve si zopakujeme obecné řešení pro částici s energií vyšší než konstantní potenciál, potom rovnici upravíme pro energii částice nižší.

Příklad 1

1.1 Napište časově nezávislou Schrödingerovu rovnici pro případ konstantního potenciálu, búno položme $V = 0$. V případě volné částice je možné chápat energii jako volný parametr. Napište řešení. Pro řešení je vhodné použít vlnový vektor k ze vztahu $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

Pozn.: Tento vztah se nazývá dispersní relace, udává, jakou energii mají částice s vlnovým vektorem. Pro volnou částici je takto jednoduchá, pro "reálnou částici" v pevné látce složitější. Pokud je jich víc, tak takovému grafu říkáme pásová struktura.

Nyní si představme situaci, kdy pro $x > 0$ je hodnota potenciálu V_+.

1.2 Napište Schrödingerovu rovnici pro tento případ. Co se stane, je-li energie částice větší než V? Jaké má rovnice řešení pro případ $E < V$?

Případ, kdy bariéra je vyšší než energie částice nastává například pro povrch materiálů. Bariéra potom odpovídá vzduchu nebo vakuu. Důležité jsou taky bariéry, které jsou konečné, tedy oblast, kde $E < V$ je jen na nějakém omezeném intervalu. V tomto případě je možné, že částice projde na druhou stranu. Tomu se bude věnovat některá z budoucích přednášek.

Pozn.: Průnik částice bariérou je častý a doslova životně důležitý, neboť jej provádějí vodíky (protony) v chemických reakcích probíhajících v našem těle. V takových případech neprobíhá tunelování pod bariérou s konstantním energetickým rozdílem, energetická bariéra má tvar spíše kopečku. V takových případech je možné přibližně vypočítat pravděpodobnost průchodu pomocí Wentzel-Kramers-Brillouinovy approximace (hlavně v 1D). Je také možné použít metodu Feynmanových dráhových integrálů, která umožňuje zahrnout i dynamiku ostatních částic (tzv. Path integral molecular dynamics). Pro představu vizte např. první video na https://www.youtube.com/user/icelcn/videos

Příklad 2 δ potenciál

Znalost tvaru řešení Schrödingerovy rovnice pro částici s energií nižší než potenciál použijeme nyní v příkladu s potenciálem tvaru δ funkce: $V = -A\delta(x)$. V ostatních bodech má potenciál hodnotu nula. Tento potenciál má vázaný stav, tedy řešení s energií nižší než nula.

2.1 Napište řešení problému v bodě mimo $x = 0$, separátně pro $x < 0$ a pro $x > 0$. Využijte přitom řešení pro $E < V$ a podmínku, že funkce musí být normalizovatelná. (Funkci ještě nenormalizujte.)

Z předešlého bodu bychom měli mít vlnovou funkci známého tvaru nicméně s volným parametrem ("vlnový vektor" k, případně energie E). Hodnotu volného parametru určíme pomocí integrace Schrödingerovy rovnice na intervalu $[-\epsilon, \epsilon]$.

2.2 Napište Schrödingerovu rovnici a integrujte ji na daném intervalu. Tj. přidejte integrál $\int_{-\epsilon}^{\epsilon}$ před všechny tři členy. Řešením získáte podmínku pro k, zpětným dosazením do Schrödingerovy rovnice pak hodnotu energie.

2.3 Funkci normalizujte.

2.4 Jak se změní tvar vlnové funkce pro silnější potenciál (vyšší hodnota A) a pro hmotnější částici?

2.5 Co by se stalo v případě, že by potenciál byl konečný?

Příklad 3 Rotátor s přidaným potenciálem

Tělesu rotujícímu v rovině (2D prostoru) říkáme rotátor. Můžeme si představit například rotující dvouatomovou molekulu (N_2 a pod.). Rotaci popíšeme pomocí úhlu ϕ, $\phi \in (0, 2\pi)$. Systém je popsán Hamiltoniánem $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{d^2}{d\phi^2}$, kde I je moment setrvačnosti částice. (Toto pochází z popisu momentu hybnosti v kvantové mechanice.) Vlastní funkce známe, jsou to $f_n(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{in\phi}$, kde $n \in Z$ a $\phi \in (0, 2\pi)$.

3.1 Jaké jsou vlastní energie pro kvantové číslo n? Vypočtěte dvěmi způsoby: i) pomocí střední hodnoty Hamiltoniánu a ii) pomocí $Hf_n(\phi) = E_n f_n(\phi)$.

Uvažujme nyní, že k Hamiltoniánu rotátoru přidáme potenciál $V = A\cos(\phi)$.

3.2 Ověřte, že funkce $f_n(\phi)$ nejsou vlastními funkcemi celkového Hamiltoniánu.

3.3 Přepište funkci $\cos(\phi)$ pomocí Eulerova vzorce a napište maticovou reprezentaci celkového Hamiltoniánu.

3.4 Najděte odhad nových vlastních energií (stačí pro vlastní čísla $-1, 0, 1.$).

Příklad 4 δ potenciál pro rotátor

Uvažujme nyní δ potenciál pro rotátor.

4.1 Jaké jsou maticové elementy potenciálu $V = -A\delta(\phi - \pi)$?

4.2 Jaké jsou maticové elementy potenciálu, který je nenulový s hodnotou $V = -A$ na intervalu $[-\epsilon, \epsilon]$ a jinak nulový?