

# Schrödingerova rovnice v 1D - vázané stavy

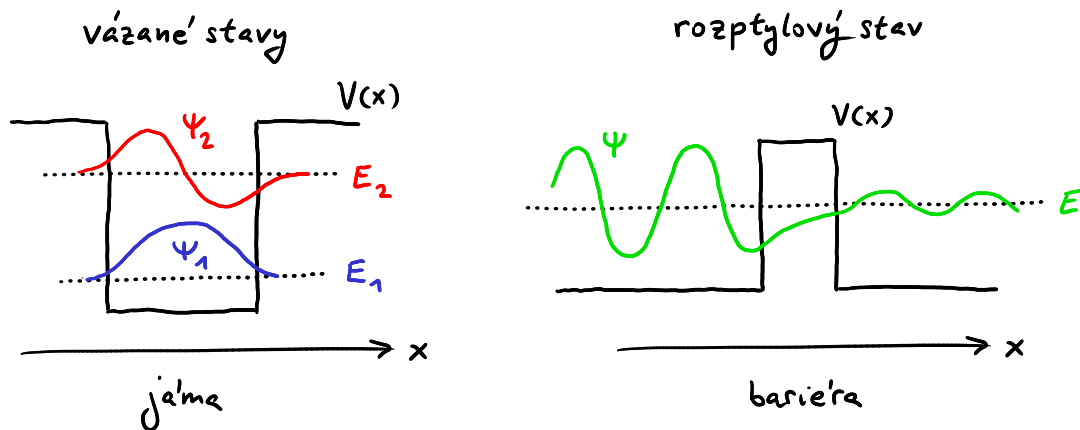
## 1) Vázané a rozptylové stavy

- vázané stavy - popisují částice zachycené v potenciálových jámách / pastech
  - částice lokalizována v nějaké části prostoru
  - obvykle nás zajímají možné energie vázaných stavů
- rozptylové stavy - popisují částice dopadající na potenciálovou bariéru (dojde k rozptylu)
  - daleko od bariéry řešení ve tvaru vln popisujících dopadající a rozptýlenou částici
  - zajímá nás pravděpodobnost průchodu bariérou (1D) nebo pravděpodobnost rozptylu do různých směrů (3D, účinný průřez)

Př. předním příkladem z přírody je atom vodíku

Př. Rutherfordův experiment

- schematické ukázky pro případ 1D Schrödingerovy rovnice



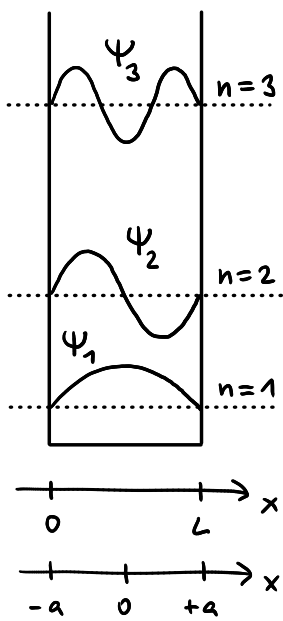
## 2) Nekonečně hluboká kvantová jáma

- částice omezena nekonečně vysokými potenciálovými valy
  - nulové  $\psi$  (a tedy nulová pravděp. výskytu) vně vymezeného intervalu
- základem příslušné vlnové funkce je řešením Sch. r. pro volnou částici

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (\text{potenciál je } V=0 \text{ uvnitř})$$

- Sch. r. je ovšem doplněna okrajovými podmínkami  $\psi(\text{okraj jámy}) = 0$   
obvykle na intervalu  $[0, L]$  nebo  $[-a, +a]$  kvůli kompaktnímu zápisu řešení

Pozn.: kvůli potenciálu s nekonečným schodkem jsou zde specifické okrajové podmínky, neaplikuje se požadavek hladkosti, který budeme používat později



- vlnové vektory  $k$  kompatibilní s okrají: podmínkami:

$$k_n = \frac{n\pi}{L} \text{ s } n = 1, 2, 3, \dots \rightarrow \text{možné energie } E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$$

◊ **diskrétní energie hladiny** v důsledku uvěznění

- normované vlnové funkce (tj.  $\int |\psi_n(x)|^2 dx = 1$ )

• pro interval  $[0, L]$

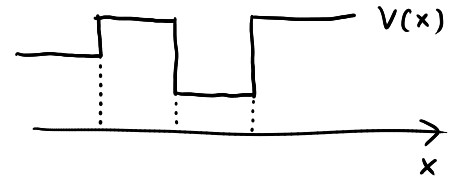
• pro interval  $[-a, +a]$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$$

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \cos \frac{n\pi x}{2a} & n \text{ liché} \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{2a} & n \text{ sudé} \end{cases}$$

### 3) Řešení Schrödingerovy rovnice pro konstantní potenciál v 1D případě

motivace: nejjednodušší typ řešení & základní element řešení Sch. r. pro po částech konstantní potenciály, které budeme využívat v dalším



• stacionární Schrödingerova rovnice v 1D

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

(relevantní v situacích s potenciálem nezávislým na  $y$  a  $z$ , bude ještě podrobně diskutováno v doplňku)

pro konstantní potenciál  $V(x) = V_0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V_0 \psi = E \psi \rightarrow \psi'' = -\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \psi$$

obyčejná diferenciální rovnice druhého řádu s konstantními koeficienty

řešení hledáme ve tvaru  $\psi = C e^{\lambda x}$ , kde  $C$  je libovolné a  $\lambda$  dáno rovnicí

$$\psi = C e^{\lambda x} \quad \psi' = C \lambda e^{\lambda x} \quad \psi'' = C \lambda^2 e^{\lambda x} \rightarrow C \lambda^2 e^{\lambda x} = -\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} C e^{\lambda x}$$

$$\text{odkud } \lambda^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$$

1) případ  $E > V_0$ : oscilující řešení s ryze imaginárním  $\lambda = \pm i \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$

praktické tvary řešení  $\psi(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}$

$$\psi(x) = a \cos kx + b \sin kx \quad k = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

není omezeno v rozsahu  $x$ , může být na celé ose  $x$  (jako volná částice)

2) případ  $E < V_0$ : exponenciálně rostoucí nebo klesající řešení s  $\lambda = \pm \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$


praktické tvary  $\psi(x) = c_1 e^{\alpha x} + c_2 e^{-\alpha x}$

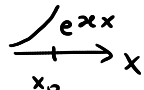
$$\alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$= a \cosh \alpha x + b \sinh \alpha x$$

použitelné jen na omezeném intervalu  $x$ , kvůli nebezpečí singularit  $\psi \rightarrow \infty$

a) interval omezený z obou stran -  $c_1$  i  $c_2$  mohou být nenulové

b) interval  $[x_0, \infty)$  -  $c_1$  musí být nulové, zůstane 

c) interval  $(-\infty, x_0]$  -  $c_2$  musí být nulové, zůstane 

#### 4) Podmínky spojitosti a hladkosti pro $\Psi$

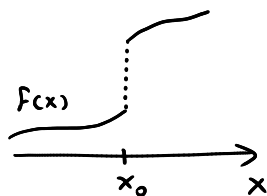
• fyzikální  $\Psi(x)$ , jehož kvadrát abs. hodnoty  $|\Psi(x)|^2$  má odpovídat hustotě pravděpodobnosti, musí mít konečné hodnoty

• uvažujme dále, že jde o řešení stac. Sch. r. s potenciálem, který obsahuje nanejvýš konečné nespojitosti (konečné „schodky“)

Sch. r.  $\Psi'' = -\frac{2m(E-V)}{\hbar^2} \Psi$  pak připouští nanejvýš konečné nespojitosti v  $\Psi''$

→  $\Psi$  musí být spojitá a hladká (tj.  $\Psi'$  je spojitá)

Pozn: derivace nespojité funkce přináší nekonečnou singularitu



$\frac{df}{dx}$  je dobře definovaná pro  $x_0 \pm \epsilon$  ( $\epsilon \rightarrow 0$  kladné)

ale  $\frac{df}{dx}|_{x_0}$  diverguje:  $\frac{f(x_0+\epsilon) - f(x_0-\epsilon)}{2\epsilon} \rightarrow \infty$   
(nebo  $-\infty$ , když je šok dolů)

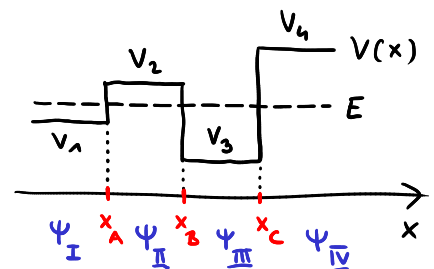
(singularitu opisuje tzv. Diracova  $\delta$ -funkce)

#### 5) Postup při řešení Sch. r. s po částech konstantním $V(x)$

1) osu  $x$  rozdělíme na oblasti s konst.  $V$

2) v jednotlivých oblastech zapíšeme obecné řešení Sch. r. omezené případně dodatečnými podmínkami dané úlohy

Př.  $\Psi_I(x) = a_1 e^{ik_1 x} + b_1 e^{-ik_1 x}$   $k_1 = \sqrt{2m(E-V_1)}/\hbar$   
 $\Psi_{IV}(x) = a_4 e^{-\alpha_4 x}$   $\alpha_4 = \sqrt{2m(V_4-E)}/\hbar$  ( $e^{\alpha_4 x}$  nelze)



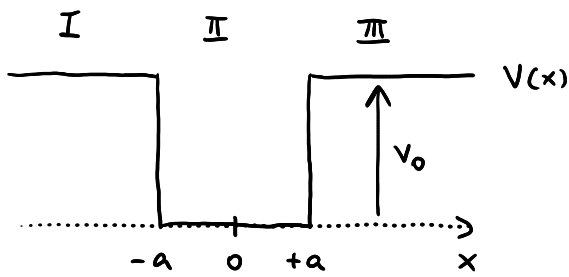
3) v dělicích bodech mezi oblastmi zformulujeme podmínky spojitosti a hladkosti

Př. v bodě  $x_A$ :  $\Psi_I(x_A) = \Psi_{II}(x_A)$  a  $\Psi_I'(x_A) = \Psi_{II}'(x_A)$ , podobně pro  $x_B, x_C$

4) vyřešíme vzniklou soustavu rovnic pro koeficienty (lineární systém)

- v některých případech podmínky řešitelnosti soustavy omezí možné energie  $E$  jen na určitou sadu hodnot (bude u vázaných stavů - jámy a pod.)

## 6 Konečně hluboká kvantová jáma



potenciál jámy

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x \in (-\infty, -a) \\ 0 & x \in (-a, +a) \\ V_0 & x \in (+a, +\infty) \end{cases}$$

- tři pásma energií  $E > V_0$  - dvě nezávislá řešení pro libovolnou  $E$ 
  - spojité spektrum energií
  - interpret.: částice překonávajíci jámu směrem vpravo/vlevo
- $0 < E < V_0$  - řešení možné jen pro několik hodnot  $E$ 
  - diskrétní spektrum energií
  - interpretace: částice uvězněná v jámě - vázaný stav
- $E < 0$  - řešení není možné

- řešení pro pásmo  $0 < E < V_0$

$$\Psi_I(x) = A e^{\alpha(x+a)}$$

$$\alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\Psi_{II}(x) = B \cos kx + C \sin kx$$

$$\Psi_{III}(x) = D e^{-\alpha(x-a)}$$

( $\Psi_I, \Psi_{III}$  nemohou obsahovat  $e^{-\alpha x}$  resp.  $e^{\alpha x}$ )

podmínky spojitosti a hladkosti - „sešívání“ řešení v bodech  $x = \pm a$

$$\Psi_I(-a) = \Psi_{II}(-a) \rightarrow A = B \cos ka - C \sin ka \quad (1)$$

$$\Psi_I'(-a) = \Psi_{II}'(-a) \rightarrow \alpha A = k B \sin ka + k C \cos ka \quad (2)$$

$$\Psi_{III}(+a) = \Psi_{II}(+a) \rightarrow D = B \cos ka + C \sin ka \quad (3)$$

$$\Psi_{III}'(+a) = \Psi_{II}'(+a) \rightarrow -\alpha D = -k B \sin ka + k C \cos ka \quad (4)$$

rovnice pro  $A, B, C, D$  - homogenní lineární systém, podmínkou řešitelnosti je nulový determinant matice systému  $\rightarrow$  omezení možných  $E$  skrze  $\alpha, k$

struktura rovnic ovšem navede k elegantnějšímu zpracování:

$$(1) \quad A = B \cos ka - C \sin ka$$

$$(3) \quad D = B \cos ka + C \sin ka$$

}  $\rightarrow$

$$A + D = 2B \cos ka$$

$$A - D = -2C \sin ka$$

$$\rightarrow \alpha = k \tan ka$$

$$(2) \quad A = \frac{k}{\alpha} (B \sin ka + C \cos ka)$$

$$(4) \quad D = \frac{k}{\alpha} (B \sin ka - C \cos ka)$$

}  $\rightarrow$

$$A + D = \frac{k}{\alpha} 2B \sin ka$$

$$A - D = \frac{k}{\alpha} 2C \cos ka$$

$$\rightarrow \alpha = -k \cotan ka$$

$\uparrow$

rovnice o jedné neznámé  $E$

- modrou a červenou rovnici zjevně nelze splnit zároveň:

bud' platí  $x = k \tan ka$  a k tomu  $A - D = 0, C = 0 \rightarrow \Psi$  je sudá funkce

nebo  $x = -k \cotan ka$  a k tomu  $A + D = 0, B = 0 \rightarrow \Psi$  je lichá funkce

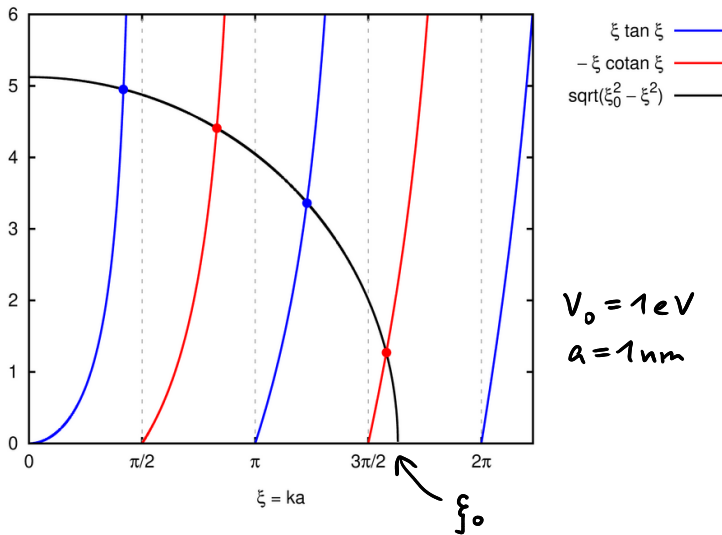
- úpravy směřující k bezrozměrnosti a kompaktnosti:

$$x = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - \frac{2mE}{\hbar^2}} = \sqrt{k_0^2 - k^2} \quad \text{kde } k_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$$

$$x = k \tan ka \rightarrow \sqrt{k_0^2 - k^2} a = ka \tan ka \rightarrow \sqrt{\xi_0^2 - \xi^2} = \xi \tan \xi \quad \xi = ka$$

$$\text{podobně } x = -k \cotan ka \rightarrow \dots \rightarrow \sqrt{\xi_0^2 - \xi^2} = -\xi \cotan \xi \quad \xi_0 = k_0 a = \frac{\sqrt{2mV_0} a}{\hbar}$$

- grafické řešení rovnic



postřehy:

1) každý průsečík udává jedno možné ka energii získáme pomocí  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

2) vždy existuje alespoň jedno řešení

$$\text{počet řešení} = 1 + \text{celá část } \frac{k_0 a}{\pi/2}$$

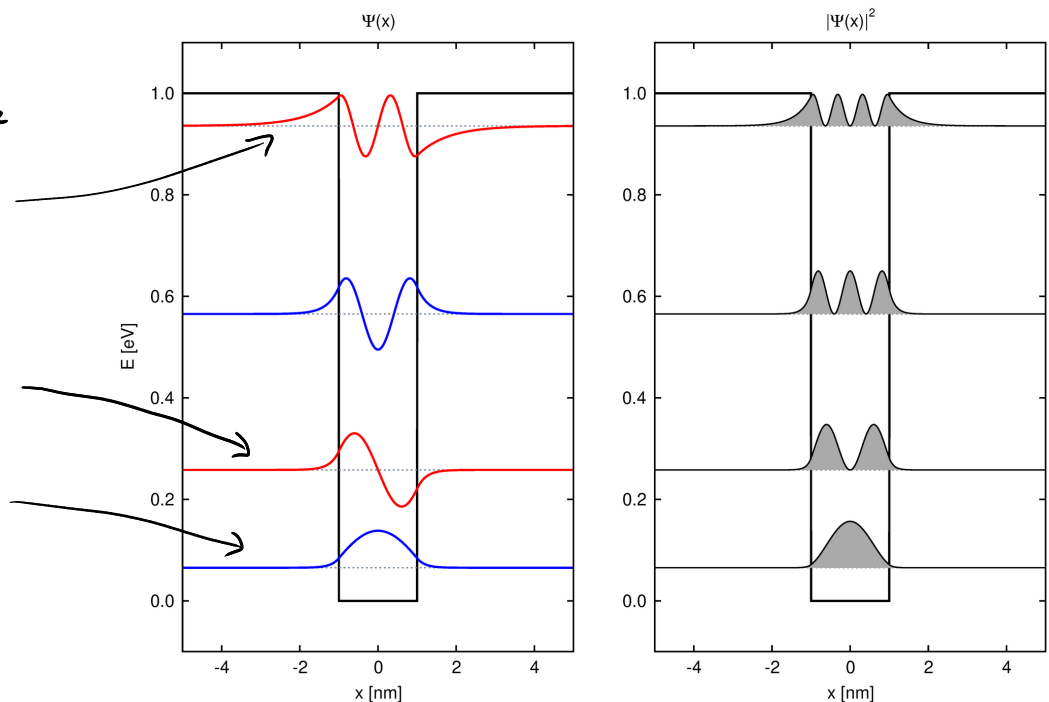
3) střídají se sudá a lichá řešení  
nejnižší stav je sudý

pohled na vlnové funkce a hustoty pravděpodobnosti vázaných stavů ( $V_0 = 1\text{eV}, a = 1\text{nm}$ )

pro vyšší  $E$  je  $x$  menší a  $\Psi$  tedy více vyčuhuje mimo klasický povolený interval  $[-a, +a]$

první excitovaný stav

vlnová funkce  
nejnižšího stavu  
- označován jako  
základní stav



- ukážky pro různé parametry jámy: větší  $a$  nebo  $V_0 \rightarrow$  větší  $f_0 \rightarrow$  více vázaných stavů  
 systematická počtu uzlů, parity, ocasů  
 velké  $V_0$  - přechod k nekonečně hluboké jámě

• přechod k nekonečně hluboké jámě

- s rostoucím  $V_0$  roste:  $f_0 \sim \sqrt{V_0} a$  a tedy poloměr kružnice v grafické řešení
- pro  $V_0 \rightarrow \infty$  se budou jednotlivé modré a červené větve protínat s kružnicí v asymptotách, to jest pro  $ka = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \dots$  suda řešení  
 $ka = \pi, 2\pi, \dots$  liché řešení
- hodnota  $x \rightarrow \infty$ , exponenciální ocasy ihned spadnou na nulu

7 Obecné vlastnosti vázaných stavů v kvantových jámách

• pozorování ukazek pro jámy se stejnou pološířkou

- pravouhlá, lineární, asymetrická lineární, parabolická, gaussovská

• závěry z pozorování 1) reálné vlnové funkce

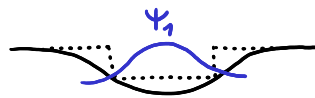
- 2) roste počet uzlů (základní stav bez uzlů, poté přibývají po jednom)
- 3) u symetrických jam se střídají sude a liché funkce (základní stav sudý)
- 4) hlubší a/nebo širší jámy pojímou více vázaných stavů
- 5) rozložení energií závisí na tvaru jámy

• další poznatky

1) ortogonalita vlnových funkcí s různými energiemi

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m^*(x) \Psi_n(x) dx = 0 \quad \text{pro } \Psi_m, \Psi_n \text{ odpovídající } E_m \neq E_n$$

2) pro každou 1D jámu existuje alespoň jeden vázaný stav



intuitivní argument využívající vepsanou pravouhlou jámu

3) nulový tok hustoty pravděpodobnosti

(bude zaveden v kontextu rozptylových stavů)

## Doplňek 1

Cesta od 3D Schrödingerovy rovnice k 1D (odůvodnění smysluplnosti 1D u'loh)

- pro **potenciál závislý jen na jedné souřadnici**: např.  $V(\vec{r}) \rightarrow V(x)$

**Př.** polovodičová heterostruktura tvořená „sendvičem“ AlAs/GaAs/AlAs probírána v kontextu vázaných stavů

- 3D stacionární Schrödingerova rovnice se podvolí metodě **separace proměnných**

$$\Psi(\vec{r}) = \alpha(x) \beta(y) \gamma(z) \quad \text{dosazeno do} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi + V(x) \Psi = E \Psi$$

$$\text{dáva} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} (\alpha'' \beta \gamma + \alpha \beta'' \gamma + \alpha \beta \gamma'') + V \alpha \beta \gamma = E \alpha \beta \gamma \quad /: \alpha \beta \gamma$$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\alpha''}{\alpha} + V(x)}_{\text{Funkce pouze } x} + \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\beta''}{\beta}}_{\text{Funkce } y} - \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\gamma''}{\gamma}}_{\text{Funkce } z} = E \quad \rightarrow \text{funkce musí být konstantami}$$

rozpadne se na tři diferenciální rovnice

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \alpha'' + V \alpha = E_x \alpha}_{\text{1D Sch.r. zkoumaná dříve}} \quad \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \beta'' = E_y \beta}_{\text{rovnice pro volný pohyb v } y \text{ a } z \text{ směru}} \quad \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \gamma'' = E_z \gamma}_{\text{rovnice pro volný pohyb v } y \text{ a } z \text{ směru}} \quad \text{přičemž } E = E_x + E_y + E_z$$

1D Sch.r. zkoumaná dříve rovnice pro volný pohyb v y a z směru

- výsledné řešení:  $\Psi(x, y, z) = \alpha(x) e^{i k_y y} e^{i k_z z} \quad E = E_x + \frac{\hbar^2 (k_y^2 + k_z^2)}{2m}$

$\alpha(x), E_x$  získané z řešení 1D Sch.r.,  $k_y, k_z$  jsou volné

## Doplňek 2 - ověření některých vlastností vázaných stavů

Ad 1) ověření ortogonality (pro jednoduchost  $\Psi$  reálná a vynecháme \*)

$$\Psi_m \text{ a } \Psi_n \text{ splňují Sch.r.:} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi_m'' + V \Psi_m = E_m \Psi_m \quad (1) \quad \cdot \Psi_n \text{ a integrovat } \int_{-\infty}^{\infty} dx$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi_n'' + V \Psi_n = E_n \Psi_n \quad (2) \quad \cdot \Psi_m \text{ a integrovat } \int_{-\infty}^{\infty} dx$$

vy násobením doplňkovým  $\Psi$  a integrací vytvoříme kombinaci:  $\int \Psi_m(2) - \int \Psi_n(1)$ :

$$\underbrace{E_n \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m \Psi_n dx - E_m \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n \Psi_m dx}_{(E_n - E_m) \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m \Psi_n dx} = \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m V \Psi_n dx - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n V \Psi_m dx}_0 - \frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\left( \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m \Psi_n'' dx - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n \Psi_m'' dx \right)}_0$$

$$\hat{H} = \Psi_m \Psi_n' \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m' \Psi_n' dx - \Psi_n \Psi_m' \Big|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n' \Psi_m' dx = 0$$

(integrály se odečtou a vyčíslení v nekonečných mezích dá nulu, protože tam váz. stavy nedosahují)

→ vznikla rovnost  $(E_n - E_m) \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m \Psi_n dx$ , která pro  $E_n \neq E_m$  implikuje ortogonalitu  $\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m \Psi_n dx = 0$

Ad 3) ověření nulového toku

vlnová funkce  $\psi(x,t) = \Psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$   $E$  je energie vázaného stavu,  $\Psi(x)$  je reálná funkce

$$\bar{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left[ \Psi(x) e^{\frac{i}{\hbar} E t} \frac{d}{dx} \Psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} - \Psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \frac{d}{dx} \Psi(x) e^{\frac{i}{\hbar} E t} \right] = 0$$

→ nulový tok hustoty pravděpodobnosti - konzistentní s  $|\psi(x,t)|^2 = |\Psi(x)|^2$  nezávislou na čase