2 Jednorozměrná Schrödingerova rovnice

2.1 Volná částice

Najděte řešení 1D Schrödingerovy rovnice, které odpovídá pohybu volné částice s energií E. Dále diskutujte případ s konstantním potenciálem V_0, zvlášť pro $V_0 < E$ a $V_0 > E$.

2.2 Vlnové klubko s gaussovským rozdělením •

Najděte vlnovou funkci vlnového klubka v čase $t = 0$ vzniklého skládáním řešení 1D Schrödingerovi rovnice pro volnou částici. Uvažujte gaussovské rozložení vlnového čísla k:

$$A(k) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{4}}\sqrt{\sigma}} \exp\left[-\frac{(k-k_0)^2}{4\sigma^2}\right].$$

Zjistěte, jestli je vzníklá vlnová funkce správně normovaná. Spočítejte střední hodnotu polohy, kvadrátu polohy, střední hodnotu hybnosti, kvadrátu hybnosti a vyjádřete součin kvadratických odchylek polohy a hybnosti $\Delta x \Delta p$.

2.3 Vlnové klubko s obdélníkovým rozdělením •

Najděte vlnovou funkci vlnového klubka v čase $t = 0$ vzniklého skládáním řešení 1D Schrödingerovi rovnice pro volnou částici. Uvažujte obdélníkové rozložení vlnového čísla k:

$$A(k) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{k_2 - k_1}}, & k_2 \geq k \geq k_1 \\ 0, & \text{jinak} \end{cases}$$

2.4 Neznámý potenciál 1

Částice o hmotnosti m se pohybuje v jednorozměrném potenciálu $V(x)$. Víme, že vlnová funkce jejího základního stavu je

$$\psi(x) = \frac{A}{\cosh \lambda x},$$

kde λ je konstanta a A je normovací konstanta. S předpokladem, že potenciál $V(x)$ se v nekonečnu blíží nule, nalezněte energii základního stavu a potenciál $V(x)$.

2.5 Neznámý potenciál 2

Částice o hmotnosti m se pohybuje v jednorozměrném potenciálu $V(x)$. Vlnové funkce jejího základního stavu a prvního excitovaného stavu jsou

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \qquad \text{a} \qquad \psi_1(x) = \sqrt{2\pi}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{4}} x \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right).$$

Najděte potenciál $V(x)$ a rozdíl energií uvedených dvou stavů.

2.6 Hustota toku pravděpodobnosti

S pomocí jednorozměrné Schrödingerovy rovnice popište časový vývoj hustoty pravděpodobnosti $|\psi(x,t)|^2$ a ukažte, že lze zformulovat příslušnou rovnici kontinuity, v níž jako hustota toku pravděpodobnosti figuruje veličina

$$j(x,t) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right).$$

Určete hustotu toku pravděpodobnosti pro volnou částici s vlnovou funkcí $\psi(x,t) = A\mathrm{e}^{i(kx - Et/\hbar)}$, kde $E = \hbar^2 k^2/2m$.

2.7 Nekonečně hluboká jáma •

Najděte vlnové funkce stacionárních stavů částice o hmotnosti m pohybující se v nekonečně hluboké potenciálové jámě o šířce a. Uvažujme dvě možná zavedení potenciálu jámy:
(a) $V(x) = 0$ pro $0 < x < a$ a $V(x) \to \infty$ jinak.
(b) $V(x) = 0$ pro $-\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}$ a $V(x) \to \infty$ jinak.
Část řešení SSR uvnitř jámy lze hledat např. ve tvaru $\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$ nebo např. $\psi(x) = A\exp(-ikx) + B\exp(ikx)$. Vyzkoušejte postupně oba výše uvedené tvary řešení pro obě varianty zadaného potenciálu.

2.8 Počítání hladin

Pro elektron, který je uzavřen v jednorozměrné krabici o šířce 10nm, vypočtěte počet energiových hladin ležících mezi 9 a 10 eV.

2.9 Tlak elektronu

Elektron je uvězněn v jednorozměrném chlívku o šířce $a = 10^{-10}$ m. Určete:
(a) Energii elektronu v základním a prvním excitovaném stavu.
(b) Tlak eletronu na stěny chlívku v těchto stavech.

2.10 Rozmazání částice v jámě ✡

Pro částici pohybující se v nekonečně hluboké jednorozměrné potenciálové jámě vymezené $x = 0$ a $x = a$ ukažte, že střední hodnota její souřadnice x je $\langle x \rangle = a/2$ a střední čtverec odchylky od této hodnoty je $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = (a^2/12)(1 - 6/\pi^2 n^2)$. Ukažte, že v případě, kdy n nabývá velmi velkých hodnot, tato hodnota souhlasí s hodnotou klasickou.

2.11 Jáma s konečnou hloubkou

Vypočtěte možné hodnoty energie částice pohybující se v potenciálu $V(x)$, kde $V(x) = -V_0$ pro $-a \leq x \leq +a$ a $V(x) = 0$ vně tohoto intervalu. Vyjádřete se k existenci vázaného stavu v dané jámě.

2.12 Polovodičová kvantová jáma

V polovodičových heterostrukturách lze poměrně snadno realizovat jednorozměrné kvantové jámy. Jako příklad nám poslouží tenká vrstva InAs obklopená mocnými vrstvami GaAs. Vrstva InAs má tloušťku $L = 10$ nm a chová se jako jáma o hloubce $V_0 = 0.5$ eV. Je nutno přihlédnout k tomu, že elektrony v polovodičích se pohybují jako efektivní částice s hmotností $m^* \ll m_e$, kde m_e je hmotnost elektronu. Efektivní hmotnost m^* v InAs a GaAs se mírně liší, vezmeme pro jednoduchost hodnotu $m^* = 0.07 m_e$. Vypočtěte energie vázaných stacionárních stavů a srovnejte je s odpovídajícími energiemi v nekonečně hluboké jámě.

2.13 Symetrická a asymetrická jáma ✡

Mějme dvě jednorozměrné jámy s potenciály

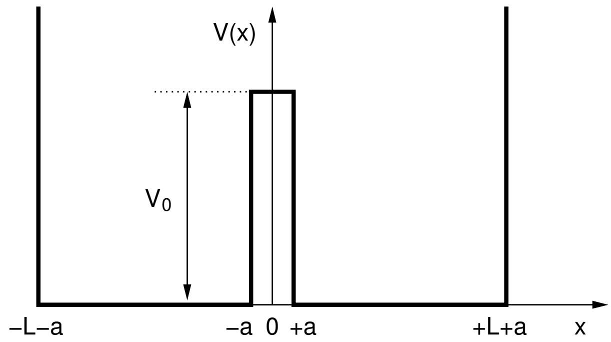
$$V_A(x) = \begin{cases} +\infty & x < 0 \\ -V_1 & 0 \leq x \leq a \\ 0 & a < x \end{cases} \qquad \text{a} \qquad V_B(x) = \begin{cases} 0 & x < -a \\ -V_2 & -a \leq x \leq a \\ 0 & a < x \end{cases}$$

(a) Zformulujte rovnice pro vlastní energie částice o hmotnosti m, která se pohybuje v potenciálu V_A resp. V_B.
(b) Jaký je vztah mezi vlastními stavy jam, když platí $V_1 = V_2$?
(c) Kolik existuje nezávislých stavů pro danou energii $E > 0$ a jaký je jejich charakter?
(d) U vázaných stavů porovnejte pravděpodobnost výskytu částice uvnitř a vně jámy. Může být v nějakém případě pravděpodobnější nalézt částici vně jámy?

2.14 Sousedící jámy ✡

Uvažujme o systému dvou jam oddělených přepážkou. Systém je popsán potenciálem

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



Najděte rovnice pro energie vázaných stavů. Využijte přitom zrcadlovou symetrii problému, která rozdělí vázané stavy do dvou tříd. Je-li přepážka dostatečně nepřekonatelná, lze si představovat vázané stavy v systému jako symetrické/antisymetrické kombinace vázaných stavů izolovaných jam. Tyto kombinace mají velmi blízké energie E_1, E_2, jejichž rozdíl $\Delta E = E_2 - E_1$ bude záviset na amplitudě tunelování z jedné jámy do druhé. V přiblížení $\Delta E \ll E_{1,2} \ll V_0$ ukažte, že skutečně platí úměrnost $\Delta E/E \propto \mathrm{e}^{-2\kappa a}$, kde $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$.

2.15 δ-past

Najděte vlnovou funkci a energii vázaného stavu jednorozměrné částice o hmotnosti m pohybující se v krátkodosahovém potenciálu $V(x) = -\lambda\delta(x)$, kde $\lambda > 0$.

2.16 Dvojice δ-pastí ✡

Najděte vlnové funkce a rovnice pro energie vázaných stavů jednorozměrné částice o hmotnosti m pohybující se v potenciálu

$$V(x) = -\lambda[\delta(x-a) + \delta(x+a)] \qquad (\lambda > 0)\ .$$

Ukažte, že vždy existuje nejméně jeden a nejvýše dva vázané stavy.

2.17 δ-past v jámě ✡

Částice o hmotnosti m je uvězněna v jednorozměrné nekonečně hluboké jámě vymezené $-a < x < +a$. Ve středu jámy navíc působí přitažlivý potenciál $-aC\delta(x)$.
(a) Jaké jsou energie stacionárních stavů, které jsou popsány vlnovými funkcemi s lichou paritou?
(b) Stanovte hodnotu $C = C_0$, pro kterou má základní stav energii $E = 0$.
(c) Najděte vlnovou funkci základního stavu s $E < 0$. Hodnota C musí být větší než hodnota C_0 stanovená v bodě (b).

2.18 Jednorozměrný coulombovský potenciál ✡

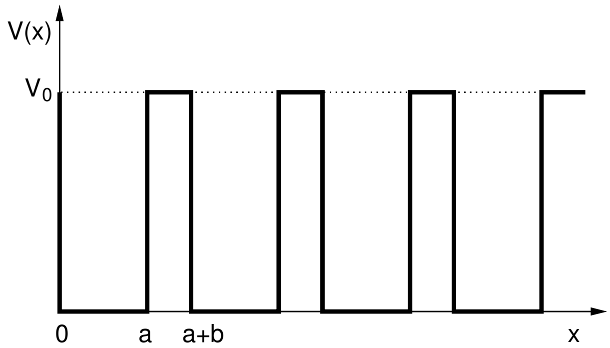
Elektron se pohybuje v jednorozměrném poloprostoru $x > 0$ a podléhá působení potenciálu

$$V(x) = -\frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0 x} \, .$$

Tato situace odpovídá elektronu pohybujícímu se nad povrchem dokonalého kovu.
(a) Najděte energii základního stavu.
(b) Najděte střední vzdálenost $\langle x \rangle$ elektronu od povrchu kovu.

2.19 Kronigův-Penneyův model ✡

Vyřešte jednorozměrnou stacionární Schrödingerovu rovnici pro periodický potenciál z následujícího obrázku. Pomůže vám přitom Blochův teorém, který praví, že řešení Schrödingerovy rovnice je tvaru $\mathrm{e}^{ikx}u_{nk}(x)$, kde u jsou periodické funkce s periodou $a + b$.



Ukažte, že hodnoty energie závislé na parametru k jsou implicitně dány rovnicí

$$\cos k(a+b) = \cos \kappa_1 a \cos \kappa_2 b - \frac{1}{2}\left(\frac{\kappa_2}{\kappa_1} + \frac{\kappa_1}{\kappa_2}\right) \sin \kappa_1 a \sin \kappa_2 b \, ,$$

kde $\kappa_1 = \sqrt{2mE_k}/\hbar$ a $\kappa_1 = \sqrt{2m(E_k - V_0)}/\hbar$. Jak je patrné z uvedené rovnice, předpokládáme $E_k > V_0$, i když obdobná rovnice se dá zformulovat i pro případ $0 < E < V_0$. Numerické řešení rovnice a nalezení E_k můžete provést, ale není to nutné.

2.20 Náraz do bariéry

Částice o hmotnosti m se pohybuje v potenciálu $V(x)$, který je nulový pro $x < 0$ a roven $V_0 > 0$ pro $x > 0$. Najděte stacionární řešení Schrödingerovy rovnice, které odpovídá částici narážející zleva na potenciálovou bariéru. Určete koeficient průchodu a odrazu, které jsou definovány jako poměry toku hustoty pravděpodobnosti procházející a odražené vlny ku toku hustoty pravděpodobnosti vlny dopadající. Zvlášť diskutujte případy $E > V_0$ a $E < V_0$.

2.21 Seskok ze schodu

Vyřešte úlohu 2.20 pro $V_0 < 0$ (urychlující potenciál). Smysl má přirozeně jen případ $E > 0$.

2.22 Tunelový jev •

Částice o hmotnosti m a energii E dopadá na bariéru danou potenciálem $V(x) = V_0 > E$ pro $0 < x < a$, $V(x) = 0$ jinak. Najděte pravděpodobnost průchodu částice bariérou a její přibližné vyjádření pro dostatečně neproniknutelnou bariéru.

2.23 α-rozpad polonia 212

Vypočtěte pravděpodobnost průchodu částice bariérou o výšce $V_0 = 26.4\,\mathrm{MeV}$ a šířce $a = 17.9\,\mathrm{fm}$. Energie částice je $E = 8.78\,\mathrm{MeV}$, hmotnost určete z údaje $mc^2 = 3727\,\mathrm{MeV}$. Uvedené hodnoty se týkají α-rozpadu jádra polonia 212, kdy se α-částice snaží uniknout z prostoru jádra a naráží přitom na coulombovskou bariéru. S přihlédnutím k frekvenci narážení α-částice do stěny bariéry, $f = 1.1 \times 10^{21}\,\mathrm{s}^{-1}$, odhadněte poločas rozpadu polonia 212. Výsledná hodnota se o mnoho řádů liší od skutečné. Je to způsobeno zejména aproximací potenciálu pravoúhlou bariérou. Výrazně přesnější odhad je proveden v příkladu 2.26.

2.24 Asymetrický tunelový jev ✡

Částice o hmotnosti m a energii E dopadá na bariéru danou potenciálem

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & 0 < x < a \\ \Delta & x > a\,. \end{cases}$$

Zde V_0 je kladná konstanta a Δ může být kladná i záporná konstanta. Ve srovnání s tunelovým jevem z příkladu 2.22 zde dochází navíc ke zpomalení/urychlení částice po průchodu bariérou. Najděte pravděpodobnost průchodu částice bariérou a prozkoumejte vliv Δ.

2.25 Rezonance při průchodu nad jámou •

Výchozí situace je stejná jako v příkladu 2.22, ale zajímáme se o případ, kdy je bariéra nahrazena jámou o hloubce V_0. Vypočtěte závislost pravděpodobnosti průchodu nad jámou na energii E a sestrojte křivku této závislosti pro případ $V_0 a^2 = \pi^2\hbar^2/m$ a $V_0 a^2 = 4\pi^2\hbar^2/m$.

2.26 Gamowova formule ✡

Pravděpodobnost průchodu částice obecnou potenciálovou bariérou může být velmi zjednodušeně odhadnuta rozložením bariéry na mnoho navazujících pravoúhlých bariér. Hledaná pravděpodobnost se pak získá jako součin pravděpodobností průchodu jednotlivými elementárními bariérami. Odvoďte na základě této představy Gamowovu formuli

$$P = \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int \sqrt{2m[V(x)-E]}\,\mathrm{d}x\right\}\,.$$

S použitím této formule výrazně vylepšíme odhad provedený v úloze 2.23. Potenciál bariéry je coulombovský potenciál popisující odpuzování α-částice (náboj $2e$) a zbytku jádra (náboj $(Z-2)e$, $Z = 84$ pro polonium)

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2(Z-2)e^2}{r}\,.$$

Rozsah bariéry je omezen na $R_1 < r < R_2$, kde $R_1 = 9.0\,\mathrm{fm}$ je poloměr jádra a $R_2 = 26.9\,\mathrm{fm}$ klasický bod obratu, pro který platí $E = V(R_2)$. Energii a hmotnost α-částice a frekvenci narážení do stěny jádra (počítanou jako $f = v/2R_1$) převezměte z příkladu 2.23 a vypočtěte pravděpodobnost úniku α-částice z jádra ^{212}Po a odpovídající poločas rozpadu. Porovnejte se skutečnou hodnotou $T_{1/2} = 0.3\,\mu\mathrm{s}$.

2.27 Gaussovský balík

Volná částice o hmotnosti m pohybující se v jednorozměrném prostoru je popsána vlnovou funkcí

$$\psi(x, t=0) = A\exp(-x^2/a^2)$$

(a) Určete normovací konstantu A.
(b) Najděte amplitudu pravděpodobnosti částice v hybnostním prostoru.
(c) Zformulujte relaci neurčitosti pro gaussovský balík.
(d) Vypočtěte $\psi(x, t)$.

2.28 Gaussovský balík v pohybu

Volná částice o hmotnosti m pohybující se v jednorozměrném prostoru je v hybnostní reprezentaci popsána vlnovou funkcí

$$\varphi(p, t=0) = A\exp\left[-\frac{(p-p_0)^2}{4\sigma_p^2}\right]$$

(a) Určete normovací konstantu A.
(b) Vypočtěte vlnovou funkci $\psi(x, t)$ v prostorové reprezentaci a přesvědčte se, že pohyb středu balíku odpovídá pohybu klasické částice s hybností p_0. Vyšetřete prostorové rozšiřování balíku s časem a interpretujte nalezenou závislost na σ_p.

2.29 Přelévání částice v jámě 1 •

Částice o hmotnosti m je uvězněna v nekonečně hluboké potenciálové jámě $0 \leq x \leq L$. V čase $t = 0$ je její normovaná vlnová funkce dána výrazem

$$\psi(x, t=0) = \sqrt{8/5L}\left[1+\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)\right]\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) .$$

(a) Vypočtěte vlnovou funkci v čase $t = t_0$.
(b) Jaká je pravděpodobnost nalezení částice v levé polovině jámy (tj. v oblasti $L/2 \leq x \leq L$) v okamžiku $t = t_0$?
(c) Vypočtěte časově závislou hustotu toku pravděpodobnosti $j(x, t)$.
(d) Kolik pravděpodobnosti „proteče“ bodem $x = L/2$ za čas $t = \pi\hbar/(E_2 - E_1)$? (e) Spočtěte časově závislou střední hodnotu polohy a hybnosti.

2.30 Přelévání částice v jámě 2 ✡

Částice o hmotnosti m se nachází v nekonečně hluboké potenciálové jámě vymezené intervalem $0 < x < a$. V čase $t = 0$ je částice rovnoměrně rozprostřena v levé polovině jámy. Její vlnová funkce tedy jest

$$\psi(x, 0) = \begin{cases} \sqrt{2/a} & 0 < x < a/2 \\ 0 & a/2 < x < a \end{cases}$$

(a) Určete vlnovou funkci $\psi(x, t)$ v libovolném čase.
(b) Jaká je pravděpodobnost nalezení částice v n-tém vlastním stavu.
(c) Zapište výraz pro střední energii částice. Co o něm soudíte?

2.31 Odhad energie základního stavu částice v kvantové jámě •

S pomocí Heisenbergovy relace neurčitosti odhadněte energii základního stavu částice v jednorozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámě o šířce L a srovnejte ji s přesnou hodnotou získanou v úloze 2.7.

2.32 Odhad energie základního stavu harmonického oscilátoru •

S pomocí relace neurčitosti odhadněte energii základního stavu harmonického oscilátoru, který se řídí stacionární Schrödingerovou rovnicí

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi=E\psi\ .$$

2.33 Odhad energie základního stavu atomu vodíku ✡

S využitím relací neurčitosti odhadněte poloměr atomu vodíku a energii základního stavu. Odhad proveďte minimalizací střední hodnoty energie. Použijte aproximaci $\langle 1/r\rangle \approx 1/\sqrt{\langle r^2\rangle}$.

2.34 Hybnostní spektrum stavů v jámě

Pomocí převodního vztahu

$$\varphi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}px}\,\mathrm{d}x$$

najděte hybnostní spektrum $\varphi(p)$ n-tého stacionárního stavu částice o hmotnosti m nacházející se v nekonečně hluboké jámě vymezené $x=-L/2$ a $x=+L/2$.

2.35 Neurčitost hybnosti v jámě ✡

Částice o hmotnosti m se nachází v základním stavu v nekonečně hluboké jámy vymezené $x=-a$ a $x=+a$. Najděte její hybnostní spektrum $\varphi(p)$ a vypočtěte s jeho pomocí střední hodnotu kvadrátu hybnosti $\langle p^2\rangle=\int p^2|\varphi(p)|^2\,\mathrm{d}p$. Kontrolu proveďte srovnáním s energií základního stavu, která je rovna $E=\langle p^2\rangle/2m$.