Kapitola 6

Aplikace stacionární Schrödingerovy teorie

Obsah:

Literatura:

[1] BEISER A. "Úvod do moderní fyziky
[2] FONG "Elementary Quantum Mechanics"

V této kapitole si ukážeme na konkrétních jednoduchých příkladech, jak stacionární Schrödingerova rovnice "funguje" v praxi. Nebudeme se zde zabývat problémy nestacionárními, to jest časovým vývojem studovaných modelových systémů. Jednoduché aplikace nestacionární Schrödingerovy rovnice si ponecháme do kapitoly následující.

Nejdříve prostudujeme ryze akademické systémy zahrnující pravoúhlé potenciály, které jsou dostatečně jednoduché, takže řešení Schrödingerovy rovnice bude možno nalézt pouze s pomocí základní matematické výbavy. Na druhé straně budou tyto příklady odrážet všechny charakteristické rysy kvantových systémů. Jako ilustrace používaných matematických metod i výsledků kvantově-mechanického přístupu jsou tedy velmi vhodné.

Bohužel řešení obecnějších systémů vyžaduje v rámci kvantové mechaniky zpravidla netriviální matematické prostředky. Je to zřejmě nezbytná daň za realističtější popis těchto systémů. Technické problémy se vyskytnou již při studiu lineárního harmonického oscilátoru, o atomu vodíku ani nemluvě. Je však rozumné prostudovat i tyto technicky netriviální příklady. Jednak proto, že jsme pro oscilátor i atom vodíku získali jisté výsledky v rámci "staré" kvantové mechaniky (Bohr, Sommerfeld) a chceme provést srovnání. A za druhé je jisté užitečné si uvědomit a odzkoušet „na vlastní kůži“, že získání informací o alespoň trochu realističtějších systémech je vždy doprovázeno odpovídající "manuální dřinou".

Protože část témat zařazených do této kapitoly má povahu složitějších příkladů a naprostá většina z nich je velmi zdařile popsána v citované literatuře (jakož i v dalších učebnicích kvantové teorie), omezíme se v následujícím zpravidla jen na velmi stručné komentáře.

6.1 Částice v jednorozměrné potenciálové jámě nekonečné hloubky

[1] str. 179-186

6.2 Částice v jednorozměrné potenciálové jámě konečné hloubky

[1] str. 187-189
[2] str. 99-104

6.3 Částice v trojrozměrné potenciálové jámě nekonečné hloubky

[1] str. 199-202

6.4 Lineární harmonický oscilátor

[1] str. 189-199
[2] str. 81 -98

6.5 Izotropní harmonický oscilátor

[2] str. 181-184

Poté, co jste si pořádně promysleli způsob řešení stacionární Schrödingerovy rovnice pro lineární (jednorozměrný) harmonický oscilátor, nemělo by nám činit žádné obtíže rozšířit získané výsledky na trojrozměrný případ. Nejdříve ale několik úvodních poznámek, které by měly objasnit pojem trojrozměrného a izotropního harmonického oscilátoru.

Uvažujme hmotný bod, který se nachází v potenciálovém poli $V(\mathbf{r})$. Nechť toto pole nabývá v počátku zvolené souřadnicové soustavy lokálního minima. Přesněji - nechť platí

$$\operatorname{grad} V(\mathbf{0}) = 0$$

a
$$K_{ij} = \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j}(\mathbf{0}) \text{ je pozitivně definitní matice } (i, j = 1,2,3). \qquad (6\text{-}1)$$

Zde jsme složky polohového vektoru **r** označili x_1, x_2 a x_3. Omezíme-li se pouze na malé kmity kolem minima potenciálu V, můžeme použít harmonickou aproximaci a pro Hamiltonovu funkci systému psát[1]

$$H(\mathbf{r},\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{i,j} K_{ij} x_i x_j\,, \qquad (6\text{-}2)$$

kde m je hmotnost uvažovaného hmotného bodu. Vhodným pootočením zvolených souřadnicových os můžeme diagonalizovat symetrickou matici K_{ij}. Označíme-li její kladná vlastní čísla[2]

[1] V následujícím položíme fyzikálně nezajímavou konstantu $V(\mathbf{0}) = 0$.
[2] Matice je pozitivně definitní.

$m\omega_1^2$, $m\omega_2^2$ a $m\omega_3^2$, můžeme v nových souřadnicích (které ale pro jednoduchost nebudeme v dalším textu odlišovat od těch, které se vyskytují výše) psát

$$H(\mathbf{r},\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \sum_i \omega_i^2 x_i^2 \,. \tag{6-3}$$

Hamiltonova funkce (6-3) pak popisuje dynamiku kmitů trojrozměrného harmonického oscilátoru. Pokud bude navíc platit

$$\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega \,,$$

hovoříme o **izotropním harmonickém oscilátoru**[3]. V tomto speciálním případě pak Hamiltonova funkce nabývá tvaru

$$H(\mathbf{r},\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \mathbf{r}^2 \,. \tag{6-4}$$

Přestože i nadále formálně používáme v zápisu (6-4) polohový vektor **r**, je jasné, že funkce H závisí ve skutečnosti jen na jeho velikosti.

Sestavit stacionární Schrödingerovu rovnici pro obecný trojrozměrný harmonický oscilátor by nám v tuto chvíli nemělo činit nejmenší potíže. Dokonce ani řešení, pokud využijeme výsledků, které jsou popsány v literatuře citované v předcházejícím paragrafu. Pro jednoduchost se však v dalším omezíme na oscilátor izotropní. Zobecnění si jistě snadno provedete sami jako jednoduché cvičení.

Pro izotropní harmonický oscilátor můžeme tedy psát

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \right) \psi(\mathbf{r}) = E \, \psi(\mathbf{r}) \,, \tag{6-5}$$

kde vlnová funkce ψ je funkcí tří reálných proměnných. Jistě nepřekvapí, že se rovnici (6-5) pokusíme řešit separací proměnných. Budeme tedy psát

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_1(x_1)\, \psi_2(x_2)\, \psi_3(x_3). \tag{6-6}$$

Již z analýzy stacionární Schrödingerovy rovnice pro částici uzavřenou v trojrozměrné krabici nekonenčné tuhosti víte, že po dosazení rozkladu (6-6) se rovnice (6-5) rozpadne na tři samostané rovnice

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d x_i^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x_i^2 \right) \psi_i(x_i) = E_i \, \psi_i(x_i) \,, \qquad i = 1,2,3, \tag{6-7}$$

kde E_i jsou konstanty splňující

$$E_1 + E_2 + E_3 = E. \tag{6-8}$$

---

[3] Jeho vlastnosti jsou v jistém slova smyslu ve všech směrech stejné.

Ovšem rovnice typu (6-7) již řešit umíte[4]. Víte, že jednotlivé funkce ψ_i získáte ve tvaru součinu Hermiteových polynomů a exponenciálního faktoru. Přesný tvar je uveden v literatuře citované v předcházejícímu paragrafu. Nás však především zajímá kvantování energie E. To získáme z formule (6-8) a ze vztahů

$$E_i = \left(n_i + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\,,\; n_i = 0,1,\,\dots\,,$$

které znáte rovněž z předcházejícího paragrafu. Pro přípustné energie izotropního harmonického oscilátoru takto získáme

$$E = \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega\,,\; n_i = 0,1,\,\dots\,. \tag{6-9}$$

Všimněte si, že narozdíl od lineárního harmonického oscilátoru jsou energetické hladiny izotropního harmonického oscilátoru obecně degenerovány - to jest jedné hodnotě energie odpovídá více kvantových stavů (vlnových funkcí resp. voleb hodnot kvantových čísel). Tak například **základní energetická hladina** $E^{(0)} = 3/2\,\hbar\omega$ odpovídá jediné volbě kvantových čísel $n_1 = n_2 = n_3 = 0$. Není tedy degenerovaná. Ale již první excitovaná hladina $E^{(1)} = 5/2\,\hbar\omega$ odpovídá třem různým volbám hodnot kvantových čísel

a) $n_1 = 1,\ n_2 = n_3 = 0$
a) $n_2 = 1,\ n_1 = n_3 = 0$
a) $n_3 = 1,\ n_1 = n_2 = 0$.

Je tedy trojnásobně degenerovaná. Analogickou diskusi si můžete provést sami i pro vyšší excitované energetické hladiny.

6.6 Schrödingerova teorie atomu vodíku

[1] str.204-220, 225-232

[4] Uvědomme si opět, že rozklad (6-6) nemusí obecně ani v nekonečných lineárních kombinacích poskytnout všechna řešení rovnice (6-5). Ve skutečnosti tomu tak naštěstí je. Dokázat toto tvrzení by však dalo trošku práce.

Příklady

1) Zformulujte stacionární Schrödingerovu rovnici pro obecný trojrozměrný harmonický oscilátor a metodou separace proměnných nalezněte její řešení a kvantové energetické hladiny. Diskutujte degeneraci těchto hladin.

2) Určete rozložení hustoty pravděpodobnosti výskytu elektronu v atomu vodíku v základním stavu. V tomto stavu dále vypočítejte střední vzdálenost elektronu od jádra a střední kvadratickou fluktuaci této vzdálenosti.

3) Jak jsou degenerovány energetické hladiny atomu vodíku?

Propočtěte si příklady z [1] str. 202-203.