Kapitola 7

Aplikace nestacionární Schrödingerovy teorie

Obsah:

7.1 Částice v jednorozměrné potenciálové jámě nekonečné hloubky
7.2 Volná částice
7.3 Průnik potenciálovou bariérou

Literatura:

[1] BEISER A. „Úvod do moderní fyziky“
[2] FONG „Elementary Quantum Mechanics“
[3] FORMÁNEK J. „Úvod do kvantové teorie“

V kapitole 6 jsme si ukázali, jak je možno použít stacionární Schrödingerovu rovnici při studiu energetických spekter vybraných modelových systémů. Ukázali jsme si na konkrétních příkladech, jaké metody máme k dispozici, a viděli jsme, že dojít ke konečnému výsledku znamená často použití netriviálního matematického aparátu i značnou „manuální“ dřinu. Problém časového vývoje kvantově-mechanických systémů jsme zatím ponechali stranou. Důvod? Ten je jasný. Řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice bude jistě totiž složitější než ve stacionárním případě. Přesto se ale zdá být užitečné alespoň stručně se o typických výsledcích nestacionární teorie zmínit. Vzhledem k matematickým komplikacím se však budeme muset omezit jen na velmi obecné poznámky.

7.1 Částice v jednorozměrné potenciálové jámě nekonečné hloubky

[3] str. 201-203

V následujícím se budeme přísně držet notace, s níž jste se setkali při studiu stacionárního chování systému v předcházející kapitole v [1]. Tam bylo ukázáno, že řešení stacionární Schrödingerovy pro částici v jednorozměrné potenciálové jámě nekonečné hloubky je dáno[1] vlastními vlnovými funkcemi (normovanými k jedničce)

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar^2}}\, x\right), \qquad (7\text{-}1)$$

kde E_n jsou kvantově přípustné energie

[1] Detaily zadání i řešení problému - viz. [1], str. 179-187

$$E_n = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2 . \qquad (7\text{-}2)$$

Časový vývoj systému v některém ze stacionárních stavů, to jest ve stavu s přesně definovanou energií, je podle kapitoly 4 dán monochromatickou vlnou[2]

$$\psi_n(x,t) = \Psi_n(x)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right) . \qquad (7\text{-}3)$$

Víme, že v tomto speciálním případě nebude fyzikálně relevantní kvadrát absolutní hodnoty vlnové funkce ψ_n záviset na čase, ani střední poloha částice v jámě nebude záviset na čase, ani další charakteristiky popisující stacionární stav (7-3).

Obvyklá představa částice s nenulovou energií vázané na úsečku je však poněkud jiná. Částice by měla vykonávat periodický pohyb zleva doprava a zpět. Perioda tohoto pohybu je podle klasických představ

$$T_c = 2L\sqrt{\frac{m}{2E}} , \qquad (7\text{-}4)$$

kde E je energie a m hmotnost studované částice a L, stejně jako výše, šířka potenciálové jámy. Vzhledem k limitnímu vztahu klasické a kvantové mechaniky bychom podobný závěr očekávali i v rámci kvantového popisu. Alespoň pro systémy svou podstatou klasické[3].

Řešení problému, na který jsme právě narazili, musíme hledat v tom, jak klasická fyzika chápe tvrzení, že částice má zadanou energii. Již dříve jsme si několikrát připomínali, že tím vždy myslíme zadanou hodnotu v rámci experimentálních chyb. A vše ostatní bude záviset na poměru mezi typickými experimentálními chybami a kvantovými skoky energie. Tak například - pokud bude kvantový skok mezi sousedním energetickými hladinami velmi malý v porovnání s typickou chybou měření energie v daném typu experimentu, klasický „systém se zadanou energií“ se vůbec nemusí nacházet ve stacionárním stavu (7-1). Naopak jeho aktuální stav může být dán „směsí“ poměrně velkého počtu těchto stacionárních stavů: všech, jejichž energie padnou do zadaných mezí experimentální přesnosti. Časový vývoj systému pak bude dán vlnovou funkcí

$$\psi(x,t) = \sum_n \Psi_n(x)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right), \qquad (7\text{-}5)$$

kde sčítáme přes všechny stacionární stavy s „vhodnou“ energií E_n. Ta je dána vztahem (7-2).

Pro ilustraci a v zájmu zachování jednoduchosti předpokládejme speciální časový vývoj typu (7-5), v němž participují pouze dva sousední stacionární stavy

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\Psi_n(x)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right) + \Psi_{n+1}(x)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_{n+1} t\right)\right\} . \qquad (7\text{-}6)$$

[2] viz formule 4-9

[3] Šířka potenciálové jámy i hmotnost v ní uzavřené částice jsou makroskopické.

Zde Ψ_n je dáno formulí (7-1). Snadno se přesvědčíte, že vlnová funkce (7-6) je

a) v každém čase normovaná k jedničce a
b) řešením nestacionární Schrödingerovy rovnice s počáteční podmínkou

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\Psi_n(x) + \Psi_{n+1}(x)\right\}.$$

Podívejme se, jak se mění kvadrát absolutní hodnoty funkce (7-6) s časem. Po úpravách snadno zjistíte, že platí

$$\left|\psi(x,t)\right|^2 = \frac{1}{2}\left\{\left|\Psi_n(x)\right|^2 + \left|\Psi_{n+1}(x)\right|^2 + 2\,\Psi_{n+1}(x)\,\Psi_n(x)\cos(\omega t)\right\}, \qquad (7\text{-}7)$$

kde

$$\omega = \frac{E_{n+1} - E_n}{\hbar}.$$

Na první pohled je zřejmé, že se výraz (7-7) mění periodicky s časem, kde perioda je dána

$$T \equiv \frac{2\pi}{\omega} = \sqrt{1 + \frac{1}{(2n+1)^2}}\,T_c\ . \qquad (7\text{-}8)$$

Ve výrazu (7-8) jsme použili klasickou periodu pohybu částice (7-4) s energií

$$E = \frac{E_{n+1} + E_n}{2}\ .$$

Vidíme tedy, že skládáním časových evolucí několika (zde dvou) stacionárních stavů získáme výsledek silně připomínající to, nač jsme zvyklí z „klasického“ světa. Hustota pravděpodobnosti výskytu částice v jednorozměrné potenciálové jámě se „přelévá“ zleva doprava a zpět s periodou, která v klasické limitě vysokých kvantových čísel souhlasí přesně s klasickým odhadem. Obrázek 7E, který jsme převzali z [3], to názorně ilustruje tím, že ukazuje závislost hustoty pravděpodobnosti(7-7) na souřadnici x v různých časech[4].

[4] Pochopitelně, že „kinogram“ uvedený na obrázku 7E má daleko k představě bodové částice pohybující se sem a tam mezi stěnami jednorozměrné krabice. Ani charakter pohybu zatím příliš nepřipomíná klasický výsledek. Zatímco se klasická částice bude pohybovat po částech rovnoměrně, hustota pravděpodobnosti (7-7) vykazuje časovou závislost danou goniometrickou funkcí kosinus. To ovšem nepřekvapí, uvědomíme-li si, že jsme příslušnou časovou evoluci skládali za použití pouze dvou stacionárních dějů. Za obvyklých klasických podmínek se totiž skládá těchto dějů mnohem mnohem více. Pak se ovšem výsledný obrázek velmi blíží klasickým predikcím.

7.2 Volná částice

[2] str. 71-80

O pohybu volných hmotných bodů jsme si již něco málo uvedli v kapitole 4. Víme, jak hmotné body reprezentovat vlnovými balíky, i to, jak se vlnové balíky šíří prostorem. Alespoň v první aproximaci. Uvedli jsme si, že v aproximaci první řádu se vlnový balík reprezentující volný hmotný bod šíří zcela ve shodě s 1. Newtonovým zákonem, to jest podle klasických pravidel. Zdůraznili jsme však, že tento závěr je důsledkem použitého přiblížení a že další efekty poskytne až přesný kvantový popis. Nadešel čas, abychom jej použili[5].

Propagaci volného vlnového balíku můžeme popsat podle návodu z paragrafu věnovaného nestacionární Schrödingerově rovnici superpozicí rovinných monochromatických vln, se kterou jsme se setkali již v kapitole 4 - viz formule (4-10) -

$$\psi(\mathbf{r},t) = \int_{R^3} \tilde{\psi}(\mathbf{k}) \exp\{i(\mathbf{k}.\mathbf{r} - \omega t)\} d^3\mathbf{k} \ ,$$

kde funkci $\tilde{\psi}$ získáváme ze zadané počáteční podmínky s pomocí vztahu (4-11). Vyčíslit tento integrál není obecně ani v těch nejjednodušších případech snadné. Omezíme se proto jen na základní rysy problému a ilustrujeme jej na speciálním případě jednorozměrného Gaussova minimalizujícího vlnového balíku. Počáteční podmínku v čase budeme tedy uvažovat ve tvaru (4-27)

$$\psi(x,t=0) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma_x^2}} \exp\left\{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma_x^2}\right\} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 x\right),$$

v němž pouze místo vlnového vektoru k_0 používáme odpovídající hybnost p_0. Po technicky náročných úpravách[6] získáme pro vlnovou funkci studovaného hmotného bodu v obecném čase t

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\Delta x(t)^2}} \exp\left\{-\frac{(x-x_0(t))^2}{4\Delta x(t)^2}\right\} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\xi(x,t)\right), \qquad (7\text{-}9)$$

kde

$$x_0(t) = x_0 + \frac{p_0}{m} t \qquad (7\text{-}10)$$

[5] Dříve než začnete číst následující řádky, rozmyslete si ještě jeden problém. Ve čtvrté kapitole jsme popsali pohyb vlnových balíků na základě analogie s optikou. V následující kapitole, tedy páté, jsme si ukázali, jak popsat obecný časový vývoj nestacionární Schrödingerovou rovnicí i jeden způsob řešení této rovnice. Pokuste se aplikovat tento postup na volný hmotný bod a ukázat, že výsledky plynoucí z nestacionární Schrödingerovy teorie jsou v souladu s představami kapitoly 4.

[6] viz [3] § 3.4.1.2

a

$$\Delta x(t)^2 = \sigma_x{}^2 + \left(\frac{\hbar}{2\sigma_x m}\right)^2 t^2 \ . \qquad (7\text{-}11)$$

Reálná funkce ξ má velmi složitou strukturu[7]. Její konkrétní tvar je však pro nás v tuto chvíli nezajímavý, neboť se vyskytuje v nepodstatném fázovém faktoru.

Jaké závěry můžeme učinit ze vztahů (7-10) a (7-11). Především opět vidíme, že se střední hodnota polohy studované částice šíří rovnoměrně přímočaře, tedy zcela ve shodě s 1. Newtonovým zákonem. Navíc však dochází k neustálému růstu střední kvadratické fluktuace polohy této částice. Kvantově-mechanická evoluce tedy zhoršuje lokalizaci částice v prostoru[8]. Tento jev se nazývá **rozplývání vlnového balíku** a má velmi zajímavé praktické důsledky. Poloha každé částice, ať je na počátku sledované časové evoluce sebelépe lokalizovaná, se bude nakonec vždy s časem stále více „rozmývat“. Tedy i vy, resp. vaše těžiště, ač nyní dobře lokalizováno, by mohlo být jednou v budoucnosti popsáno vlnovou funkcí, v souladu se kterou byste v daném okamžiku mohli být s jistou nenulovou pravděpodobností nalezeni na Zemi a s jinou nenulovou pravděpodobností například na Měsíci. Vše je jen otázkou času[9]. Pěkně absurdní představa!

Problém zřejmě bude v onom: „Vše je jen otázkou času“. Pro makroskopická tělesa je totiž, jak uvidíte z řešení příkladů k této kapitole, doba, během které dojde k zjistitelnému rozplynutí jejich vlnových balíků, velmi dlouhá. Proto se o svůj osud nemusíte obávat. Nehrozí ani, že by vlak jedoucí do Prahy s jistou pravděpodobností mohl dojet například do Košic. Jinak je tomu ovšem v mikrosvětě. Tam jsou totiž typické „rozplývací“ doby velmi krátké. Tedy - ať se snažíte sebevíce o dokonalou lokalizaci částice, není vám to nic platné. Za velmi krátkou dobu je totiž vaše úsilí v důsledku kvantových zákonů nenávratně zmařeno.

Proč dochází k rozplývání vlnových balíků, je okamžitě zřejmé z přepisu formule (7-11)

$$\Delta x(t)^2 = \sigma_x{}^2 + \left(\frac{\Delta p}{m}\right)^2 t^2 , \qquad (7\text{-}11')$$

kde $\Delta p/m$ je zřejmě neurčitost rychlosti částice v čase t=0 [10]. Vlnové balíky se tedy rozplývají tím rychleji, čim širší spektrum rychlostí je v nich zastoupeno.

---

[7] blíže opět viz [3] § 3.4.1.2

[8] Pamatujme však na to, že studujeme evoluci vlnového balíku, jehož počáteční tvar byl speciálně zvolen. Podrobnější analýza by ukázala, že jiné počáteční podmínky mohou vést k časové evoluci, během níž se bude lokalizace polohy částice po nějakou dobu zlepšovat, to jest střední kvadratická fluktuace polohy zmenšovat. Nicméně však vždy po uplynutí jistého času se začne sledovaný vlnový balík rozplývat, a to zhruba podle vztahu (7-11). S trochou nadsázky můžeme tedy říci, že se svět, ať již byl při svém vzniku sebelépe uspořádán, řítí vstříc všeobecnému chaosu.

[9] Pochopitelně vaše těžiště není volné. Nachází se v neustálé interakci s gravitačním polem Země, působí na něj tlakové a třecí síly a podobně. Pro účely kvalitativní ilustrace je však analogie s volnou částicí jistě přijatelná.

[10] A z důvodů uvedených v [3] i ve všech ostatních časech

7.3 Průnik potenciálovou bariérou

[2] str. 104-108

Představte si následující situaci. Na svém domovském hřišti hraje zápas váš oblíbený fotbalový klub. Je těsně před koncem zápasu a výsledek nerozhodný. Vše může rozhodnout jeden jediný gól. Útok hostů se rozvíjí do slibné gólové šance. Rána a ... Přestože míč zasáhl brankáře přímo do prsou, prochází jím a končí v síti domácích. Brankář je ale nezraněn a evidentně v úplném pořádku. Přesto míč prošel jeho tělem. Pěkně absurdní představa. Že jste se s něčím podobným nikdy nesetkali! Vězte však, že v kvantovém světě, na jehož zvláštnosti si pomalu začínáme zvykat, není něco podobného vůbec neobvyklé [11]. Zmiňme se tedy alespoň stručně o tom, jak kvantová mechanika dospívá k podobným závěrům.

Pro jednoduchost se opět omezíme na jednorozměrný případ. V rámci lineárního světa budeme studovat pohyb hmotného bodu ve speciálním potenciálovém poli, které se obvykle nazývá **potenciálová bariéra**. Jedná se o potenciál, který je nenulový jen na jisté omezené oblasti prostoru (zde na intervalu reálné osy) a který je na celé této oblasti, zhruba řečeno, kladný. Modelujeme jím překážku, která je okolním tělesům postavena do cesty. Typický příklad potenciálové bariéry je uveden na obrázku 7A. Vně intervalu (x_A,x_B) je potenciál nulový, na tomto intervalu má tvar kopečku.

Bez větších potíží dokážete jistě alespoň kvalitativně říci, jak bude znázorněná bariéra působit na částice pohybující se po ose x, budeme-li pracovat **v rámci klasické mechaniky**. Abychom byli konkrétní - budeme uvažovat částice, které se pohybují z oblastí popsaných nerovností $x<<x_A$ směrem k bariéře. Na obrázku jsou schematicky zakresleny dvě typické situace, které mohou nastat. Rozlišujeme je celkovou energií částice, kterou porovnáváme s hodnotou absolutního maxima potenciálu.

a) Pokud je tato energie menší než maximum potenciálu, jak je tomu v případě energie E_1, dochází v klasické mechanice k *odrazu od bariéry*. Tedy částice se bude nejdříve pohybovat rovnoměrně přímočaře zleva doprava. Od polohy x_A bude její pohyb brzděn až do okamžiku, kdy dosáhne klasického bodu obratu (x_C). V něm se zastaví a poté se pohybuje zpět. Nejdříve zrychleně a od bodu x_A rovnoměrně přímočaře rychlostí, jejíž velikost je stejná jako na počátku, ale opačně orientovaná.
b) Ve druhém případě je energie E_2 větší než maximum potenciálu. Částice v rámci klasického popisu *nad potenciálovou bariérou přelétá*. Opět se částice nejdříve pohybuje rovnoměrně přímočaře až do bodu x_A. Od tohoto okamžiku je její pohyb zpomalován až do okamžiku dosažení polohy x_0. Zde je rychlost studované částice nejmenší. Není ale nulová a míří stále do původního směru. Mezi body x_0 a x_B dochází k opětnému zrychlování částice až k dosažení původní rychlosti. Dále se částice pohybuje rovnoměrně přímočaře. Její rychlost odpovídá počáteční co do směru i velikosti.

Aby bylo vše ještě průhlednější, jsou do obrázku 7B zakresleny pro oba typické případy závislosti rychlosti pohybu studované částice na její poloze.

[11] Na tomto místě je ovšem nutno vyslovit hlubokou omluvu všem studentkám za to, že byl zvolen ryze „pánský příklad“. Přenechejme jim však jako lehké cvičení rozmyslet si podobně absurdní situaci, která by byla bližší jejich zkušenostem. Například jak jemné ručky hradní paní protahují jehlu pláty mohutného brnění jejího manžela, který se právě chystá do nějaké té středověké války.

K úplně jiným závěrům bychom však dospěli, pokud bychom celý pokus diskutovali **v rámci mechaniky kvantové**. Dříve než se pokusíme o kvantitativní řešení na základě Schrödingerovy rovnice, věnujme nějaký čas popisu výsledků, které získáme za chvíli. Důvod pro tento postup bude rovněž zřejmý z následujícího. Celý výpočet dá totiž trochu práce a jednotlivé charakteristické rysy by mohly zaniknout v matematické lopotě.

Vše je schematicky zachyceno obrázkem 7C.

a) V prvním případě, energie E_1, dostaneme kromě klasického výsledku, který byl popsán výše, ještě jeden možný výstup. Přestože částici chybí energie na překonání potenciálové bariéry, může se objevit na její druhé straně. Tomuto efektu se říká **kvantově-mechanické tunelování.** Jedná se o záležitost čistě kvantovou, která nemá žádný klasický protějšek. I v makroskopickém světě však může docházet k tunelování. Jeho pravděpodobnost je však natolik malá, že se s podobným jevem nemůžeme ve skutečnosti v běžné praxi nikdy setkat. Naopak v mikrosvětě je vše jiné. Tam je tunelování běžnou záležitostí a setkat se s ním můžete na každém kroku. Tak například je tento proces odpovědný za samovolný rozpad radio-aktivních jader a hraje významnou roli v dynamice chemických reakcí za nízkých teplot.

b) Ve druhé případě, energie E_2, můžeme opět dospět ke klasicky nestandardním závěrům. Přestože má částice dostatek energie na překonání potenciálové bariéry, může se od ní odrazit. Situace je ovšem podobná té v předcházejícím případě. V makrosvětě je tento jev natolik nepravděpodobný, že se s ním opět nemůžete prakticky vůbec setkat.

Dříve než se pustíme do počítání, pokusme si vysvětlit, jak je možno pravděpodobnost průniku bariérou a odrazu od ní kvantifikovat. Představme si následující experiment. Proti bariéře posíláme z oblasti vlevo[12] identické částice připravené ve stejném počátečním stavu (energie - rychlost a poloha). Vlevo od bariéry mějme dále umístěn detektor, který měří počet částic pohybujících se zprava doleva. Tedy částic od bariéry odražených. Vpravo od ní[13] pak detektor, který měří počet částic, které se pohybují zleva doprava. Tedy počet částic bariérou prošlých. Nechť oba přístroje měří počty částic jimi prošlých za jednotku času, tedy toky těchto částic. Navíc nechť je podobným počítadlem vybaven i náš částicový zdroj. Celý experiment nechť je odstíněn. Do oblastí, v nichž probíhá měření, nemohou tedy pronikat jiné částice než ty, které připravíme v přesně definovaném stavu v použitém zdroji částic.

Označme j, j_R a j_T počet částic emitovaných za jednotku času zdrojem, počet částic zaregistrovaných za jednotku času detektorem odražených částic (tok odražených částic) a počet částic zaregistrovaných detektorem částic prošlých bariérou (tok prošlých částic). Znaménkem odlišíme částice pohybující se zleva doprava a v opačném směru [14]. V klasickém rámci by zřejmě platilo

a) $|j_R/j| = 1$ a $j_T = 0$ pro energie menší než maximum potenciálové bariéry a

b) $|j_T/j| = 1$ a $j_R = 0$ pro energie větší než maximum potenciálové bariéry.

V případě kvantovém bude obecně platit $0<|j_R/j| < 1$ a $0<|j_T/j| < 1$v obou případech. Vždy ovšem bude splněno $|j_T/j| + |j_R/j| = 1$[15].

---

[12] zleva vzhledem k x_A.

[13] vpravo od bodu x_B.

[14] Názorněji je vše zachyceno na obrázku 7D.

[15] Poměr $|j_R/j|$ se obvykle nazývá koeficientem odrazu (reflexe) od bariéry a poměr $|j_T/j|$ koeficientem průniku (transmise). Na první pohled je zřejmé, že oba koeficienty udávají normované pravděpodobnosti odrazu resp. průniku bariérou.

Pokusme se tedy vyčíslit uvedené poměry jednotlivých toků. V obecném případě by to ovšem mohlo činit značné, především technické potíže. Správně bychom měli řešit nestacionární Schrödingerovu rovnici pro vlnové balíky superponované z monochromatických vlnových funkcí odvozených od stacionárních stavů studovaného systému s blízkými hodnotami energie[16]. To by bylo velmi obtížné. Naštěstí, jak je ukázáno například v [3], nebude nic takového nutné. Postačí totiž studovat chování řešení stacionární Schrödingerovy rovnice získané pro danou konkrétní hodnotu energie[17]. I tato úloha může být v obecném případě technicky velmi náročná. Často bez vydatné pomoci zdlouhavých numerických metod neřešitelná. Proto se v následujícím omezíme na velmi zjednodušený případ pravoúhlé potenciálové bariéry. Naše výpočty to velmi zjednoduší a základní charakteristické rysy problému zůstanou zachovány.

Průnik a odraz od pravoúhlé potenciálové bariéry

Pravoúhlou potenciálovou bariéru reprezentujeme následující funkcí

$$\begin{aligned} V(x) &= V_0 > 0 \qquad \text{pro } x \in (0,a) \\ V(x) &= 0 \qquad \text{pro } x \in (-\infty,0> \cup < a,+\infty) . \end{aligned} \tag{7-12}$$

Způsob řešení stacionární Schrödingerovy rovnice pro pravoúhlé potenciály je nám už dobře znám z předcházející kapitoly. Víme, že ji musíme řešit po částech na jednotlivých intervalech, kde je potenciál spojitou funkcí, a pak „sešít“ v hraničních bodech. Pro tento účel si rozdělme reálnou osu na tři části

část I	$x \in (-\infty,0)$
část II	$x \in (0,a)$
část III	$x \in (a,+\infty)$.

Vše, co se bude vázat k těmto částem, budeme označovat příslušnými indexy, aniž to budeme dále explicitně zdůrazňovat.

V následujícím se zabývejme pouze **kvantově-mechanickým tunelováním**, to jest případem, kdy platí $E < V_0$. Druhý typický případ, $E > V_0$, se řeší zcela analogicky, proto jej ponecháváme čtenáři jako jednoduché, i když pracné cvičení.

Nechť je tedy $E < V_0$. Naším úkolem je řešit rovnice

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi_I + k_I^{\,2}\varphi_I = 0, \tag{7-13'}$$

[16] Vzhledem k povaze potenciálu, kterým reprezentujeme naši bariéru, je zřejmé, že spektrum studovaného systému bude čistě spojité. Lineární superpozici bude tedy nutno psát v integrálním tvaru.

[17] Stacionární přístup k problému průniku potenciálovou bariérou není tak docela nesmyslný ani na první letmý pohled. Vše si můžeme představit jako alternativní mnohočásticový pohled na studovaný problém, kdy směrem k potenciálové bariéře vysíláme ze zdroje stacionární tok částic, které se od ní částečně odrážejí a částečně toutu bariérou pronikají. Vzhledem k tomu, že celý experiment provádíme v ustáleném stavu, jsou i toky odražených a prošlých částic časově nezávislé. Tyto toky jsou nutně úměrné tokům hustoty pravděpodobnosti vystupujícím v rovnici kontinuity pro Schrödingerovu rovnici. Ovšem bez explicitní závislosti na čase. Je tedy jasné, že smysluplné výsledky můžeme získat, pokud budeme používat toky pravděpodobnosti získané s pomocí řešení stacionární Schrödingerovy rovnice odpovídající energii totožné s energií částic emitovaných zdrojem .

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi_{II} - \kappa_{II}^{\ 2}\varphi_{II} = 0, \tag{7-13''}$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi_{III} + k_{III}^{\ 2}\varphi_{III} = 0, \tag{7-13'''}$$

kde

$$k_I = k_{III} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{7-14}$$

a

$$\kappa_{II} = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}\,. \tag{7-14'}$$

Symbolem m zde, jak je to obvyklé, označujeme hmotnost studované částice. Jak již bylo uvedeno, příslušné řešení odpovídá energii ze spojité části spektra. Vlnová funkce φ_I bude tedy omezená v záporném nekonečnu a funkce φ_{III} v nekonečnu kladném. Toto řešení můžeme přímo napsat, odvolávajíce se na výsledky kapitoly 6,

$$\varphi_I = A_I \exp(ik_I x) + B_I \exp(-ik_I x) \tag{7-15'}$$

$$\varphi_{II} = A_{II} \exp(\kappa_{II} x) + B_{II} \exp(-\kappa_{II} x) \tag{7-15''}$$

$$\varphi_{III} = A_{III} \exp(ik_{III} x) + B_{III} \exp(-ik_{III} x)\,. \tag{7-15'''}$$

Neznámé konstanty A, B a C určíme ze „sešívacích" podmínek, které v tomto případě plynou z požadavku spojitosti funkcí φ_I a φ_{II} a jejich prvních derivací v x=0 a funkcí φ_{II} a φ_{III} a jejich prvních derivací v x=a.

Další nezávislou podmínku ovšem dává předpoklad izolace systému od okolního světa. Z tohoto požadavku plyne totiž omezení přípustného tvaru toku částic v oblasti III. Tento tok určíme ze vzorce (5-37)[18]. V našem speciálním případě můžeme psát

$$j_{III} = \frac{\hbar k_{III}}{m}\left(\left|A_{III}\right|^2 - \left|B_{III}\right|^2\right). \tag{7-16}$$

Získaný vztah má ale snadnou interpretaci. Část vlnové funkce φ_{III} obsahující konstantu A_{III} odpovídá ve výše uvedeném smyslu částicím pohybujícím se zleva doprava a část s konstantou B_{III} naopak částicím pohybujícím se zprava doleva. Proto musíme na řešení (7-15) naložit kromě „sešívacích" podmínek ještě další nezávislou podmínku

$$B_{III} = 0. \tag{7-17}$$

[18] Připomeňme ještě jednou, že tok hustoty pravděpodobnosti je úměrný toku částic, jak jsme si jej zavedli výše.

S pomocí „sešívacích“ podmínek pak dále dostáváme[19]

$$B_I = \frac{\left[1+\left(\frac{\kappa_{II}}{k_I}\right)^2\right]\left[\exp(-\kappa_{II}a)-\exp(\kappa_{II}a)\right]}{\Delta} A_I \ , \tag{7-18}$$

$$A_{II} = 2\frac{\left[1-i\frac{\kappa_{II}}{k_I}\right]\exp(-\kappa_{II}a)}{\Delta} A_I , \tag{7-19}$$

$$B_{II} = -2\frac{\left[1+i\frac{\kappa_{II}}{k_I}\right]\exp(\kappa_{II}a)}{\Delta} A_I , \tag{7-20}$$

$$A_{III} = -4i\frac{\kappa_{II}/k_I \exp(-ik_I a)}{\Delta} A_I , \tag{7-21}$$

kde

$$\Delta = \det\begin{pmatrix} 1-i\frac{\kappa_{II}}{k_I} & 1+i\frac{\kappa_{II}}{k_I} \\ \left[1+i\frac{\kappa_{II}}{k_I}\right]\exp(\kappa_{II}a) & \left[1-i\frac{\kappa_{II}}{k_I}\right]\exp(-\kappa_{II}a) \end{pmatrix} . \tag{7-22}$$

Tok hustoty pravděpodobnosti na oblasti I pak můžeme psát ve tvaru

$$j_I = \frac{\hbar k_I}{m}\left(|A_I|^2 - |B_I|^2\right), \tag{7-23}$$

kde opět snadno interpretujeme jednotlivé sčítance: první odpovídá částicím emitovaným zdrojem a letícím vstříc bariéře, druhý pak částicím odraženým. Pro jednotlivé toky částic můžeme tedy psát

$$j = \frac{\hbar k_I}{m}|A_I|^2 \ , \tag{7-24}$$

$$j_R = -\frac{\hbar k_I}{m}|B_I|^2 \ , \tag{7-25}$$

$$j_T = \frac{\hbar k_I}{m}|A_{III}|^2 \ . \tag{7-26}$$

[19] V následujících vztazích používáme rovnost vlnových čísel k_I a k_{III}.

Koeficient reflexe či transmise pak můžeme určit s pomocí definičních vztahů a právě získaných výsledků. Po zdlouhavých úpravách bychom zjistili, že pro **koeficient transmise** je možno psát

$$T_T \equiv \left|\frac{j_T}{j}\right| = 16\left(\frac{\kappa_{II}}{k_I}\right)^2 \frac{1}{\Delta^2} \ . \qquad (7\text{-}27)$$

Koeficient reflexe T_R pak snadno dopočteme z identity $T_R + T_T = 1$.

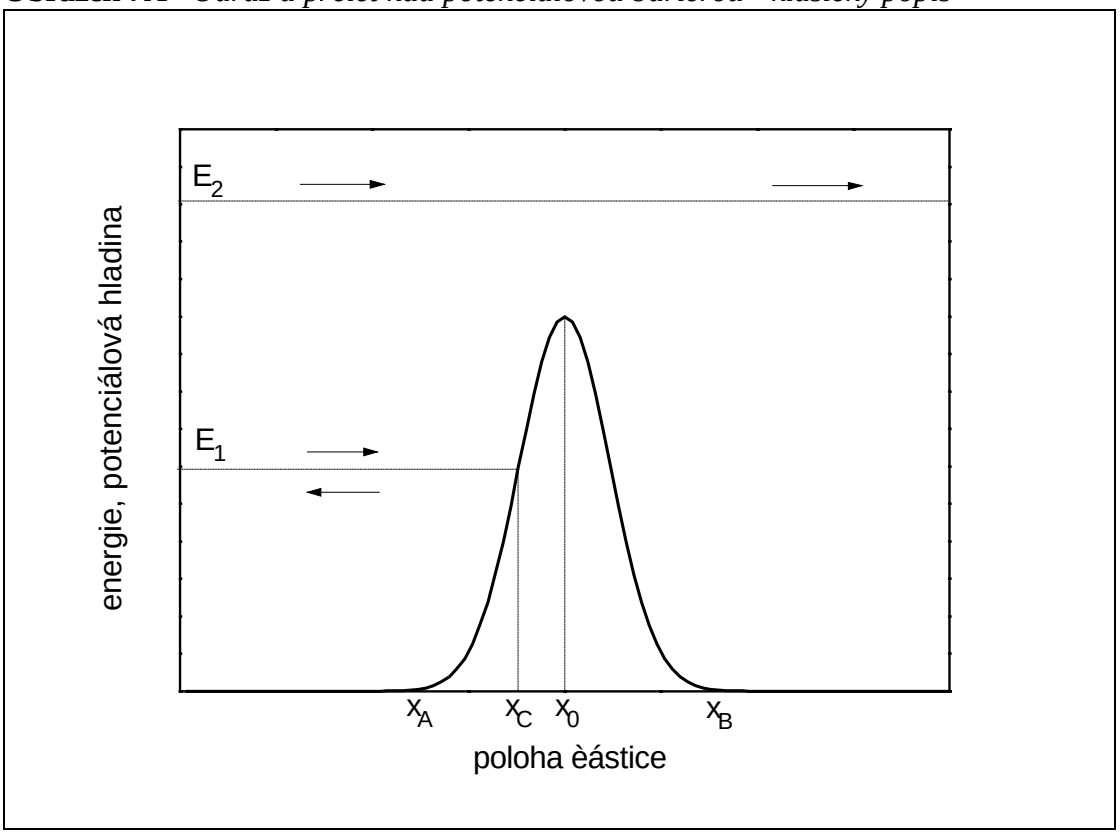
Příklady

1) Studujte závislost střední kvadratické fluktuace polohy různých hmotných bodů na čase. Počáteční stav uvažujte ve tvaru Gaussova minimalizujícího vlnového balíku.

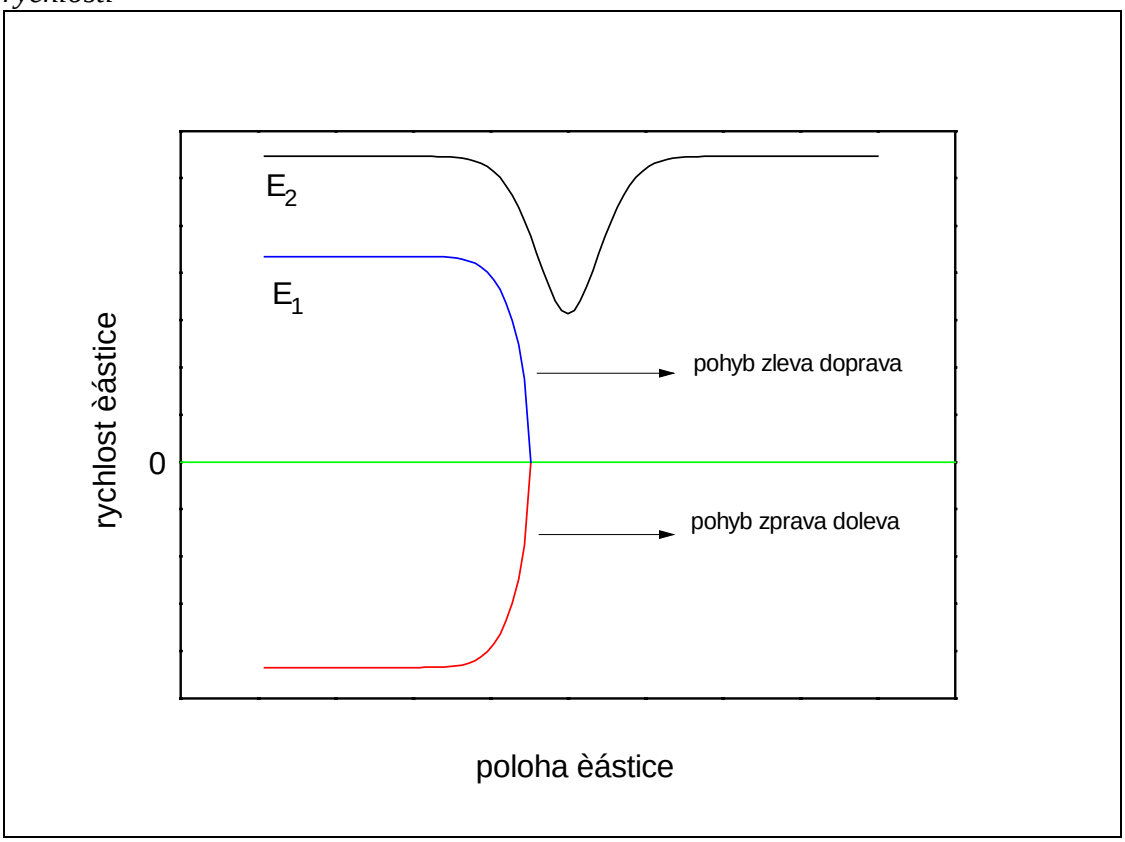
	Hmotnost	počáteční lokalizace polohy σ_x
lokomotiva jedoucí do Prahy	60 t	1 mm
člověk	70 kg	1 mm
zrníčko prachu	0,1 g	0,1 mm
zrníčko prachu ještě jednou	0,1 g	0,1 μm
molekula dusíku	$4{,}7\ 10^{-26}$ kg	0,1 μm
molekula dusíku ještě jednou	$4{,}7\ 10^{-26}$ kg	1 nm
elektron	10^{-30} kg	1 nm
elektron ještě jednou	10^{-30} kg	0,01 nm

2) Rozmyslete si, jaké typické kvantové a klasické systémy byste mohli studovat v souvislosti s kvantově mechanickým tunelováním. Pro tyto modelové systémy vypočítejte koeficienty reflexe a transmise v přiblížení pravoúhlé potenciálové bariéry. Získané výsledky interpretujte.

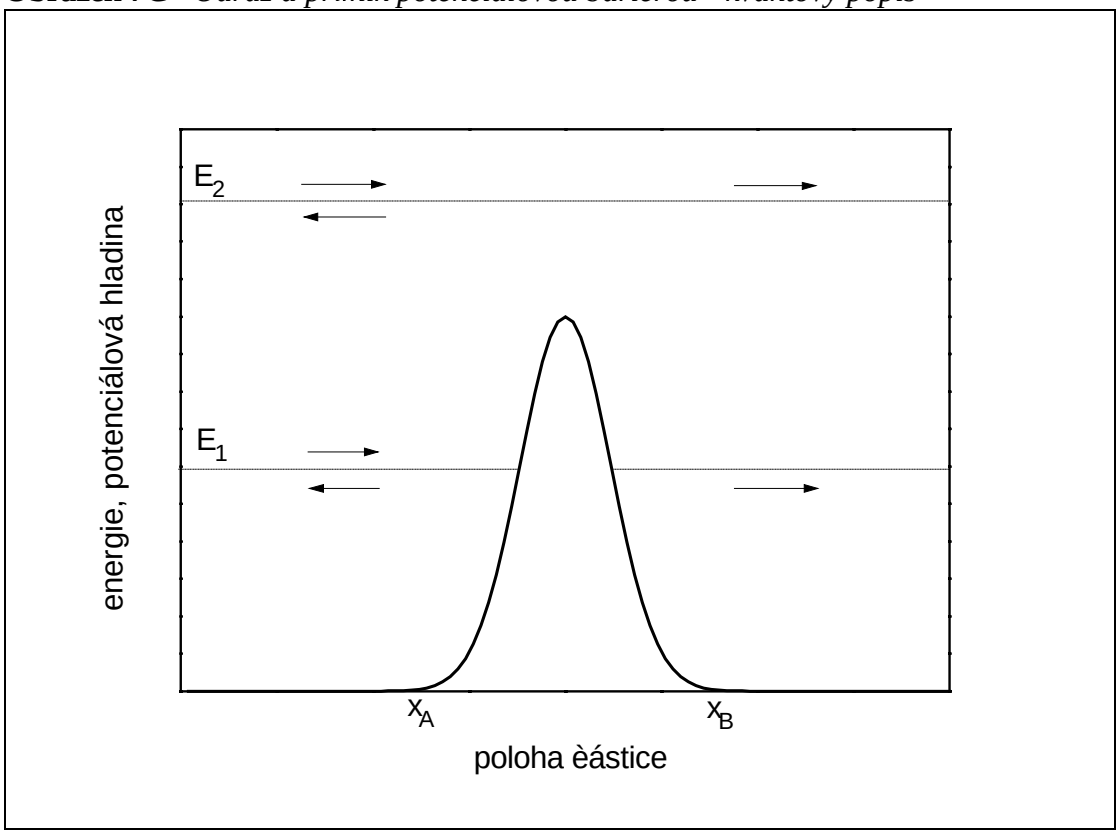
Obrázek 7A *Odraz a přelet nad potenciálovou bariérou - klasický popis*



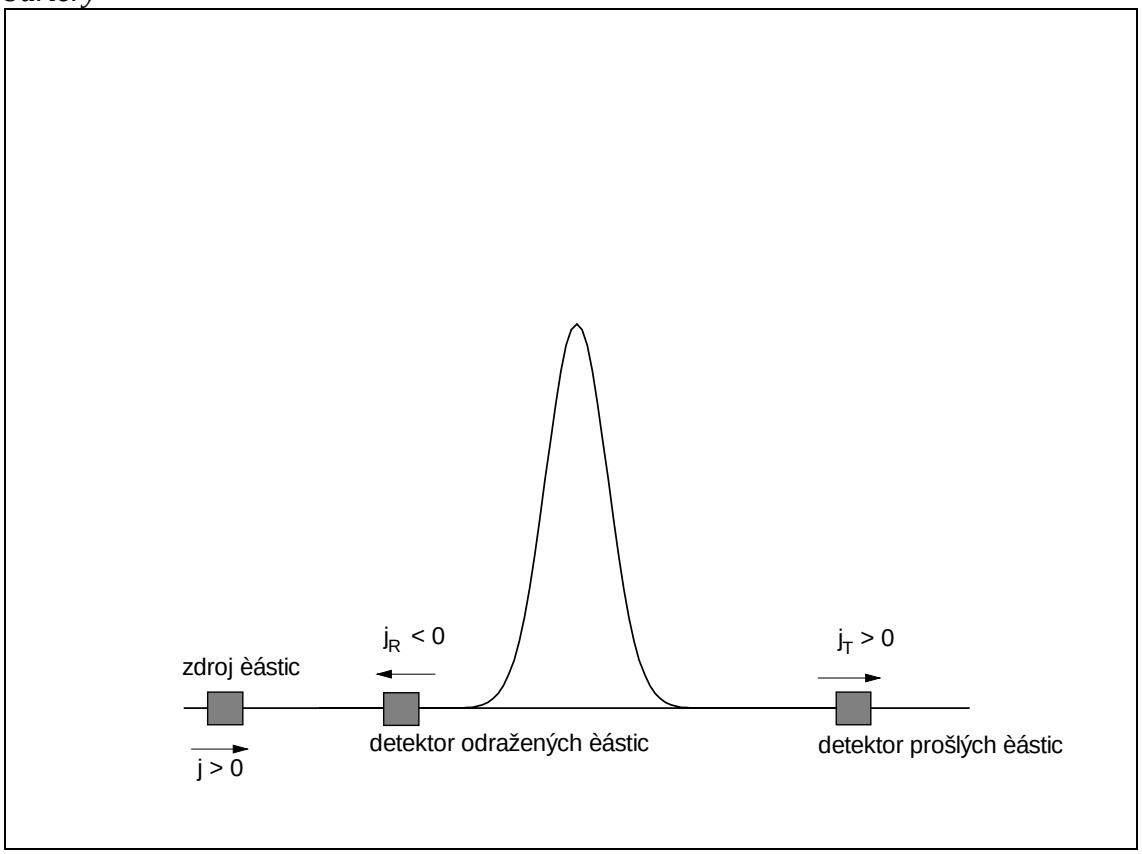
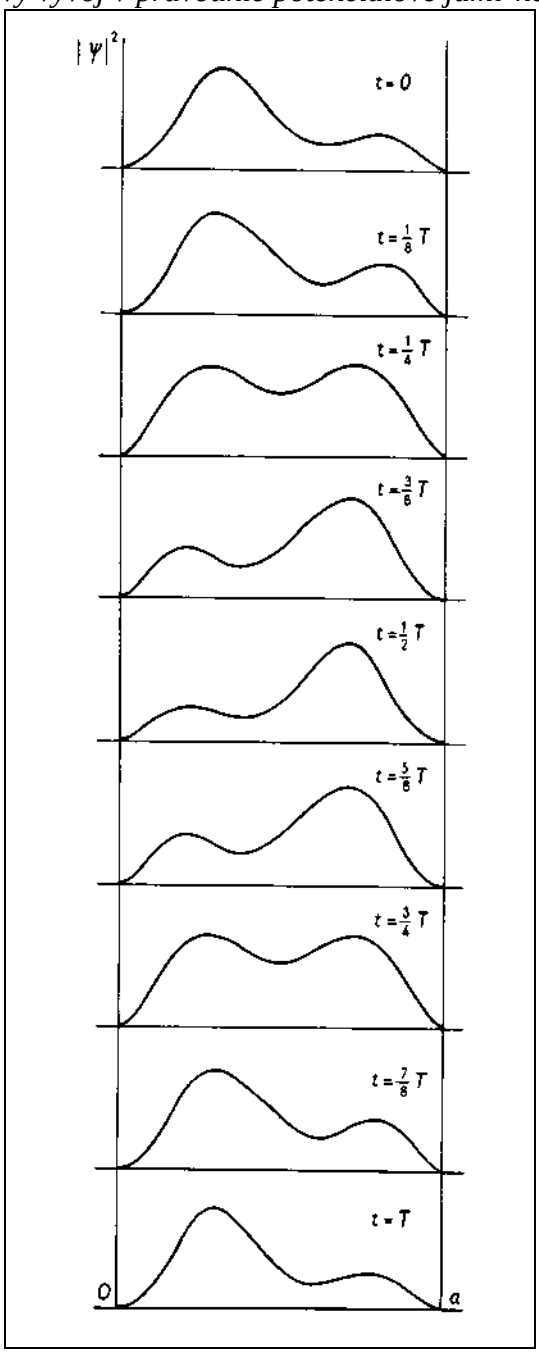
Obrázek 7B *Odraz a přelet nad potenciálovou bariérou - klasický popis : rychlosti*



Obrázek 7C *Odraz a průnik potenciálovou bariérou - kvantový popis*



Obrázek 7D *Měření pravděpodobnosti průniku a odrazu od potenciálové bariéry*



Obrázek 7E *Časový vývoj v pravoúhlé potenciálové jámě nekonečné hloubky*