6.2.8 Vlnová funkce

Předpoklady: 060207

Pedagogická poznámka: Tato hodina není příliš středoškolská . Zařadil jsem ji kvůli tomu, aby žáci měli alespoň přibližnou představu o tom, jak se v kvantové fyzice pracuje. Hodiny v následující kapitole jsou spíše přehledem některých výsledků kvantové mechaniky než skutečnou kvantovou mechanikou.
Pokud žáci neprobírali v matematice derivace, je dobré jim trochu vysvětlit, o co při derivování jde a připomenout, že grafické derivování jsme již několikrát zkoušeli (nejvíce v prvním ročníků při sledování závislostí pohybových veličin).

Jak popsat něco tak uhozeného jako je elektron? K popisu elektronu nemůžeme používat klasické pojmy jako poloha a hybnost, když nejdou současně ani změřit.

Dva matematické formalismy (zcela odlišné, stejné měřitelné předpovědi, shoda s experimenty):

- 1925 W. Heisenberg - maticový formalismus,
- 1926 E. Schrödinger - vlnová funkce.

Stav částice v okamžiku *t* je popsán komplexní funkcí $\psi(x,y,z,t)$, kterou nazýváme **vlnová funkce**.
Funkce $\psi(x,y,z,t)$:

- musí splňovat některé matematické požadavky (spojitost a spojitost parciálních derivací),
- je komplexní $\Rightarrow$ hodnoty funkce jsou komplexní čísla $a+bi$,
- proměnné x,y,z,t nemají význam polohy částice, ale místa v prostoru a času.

Funkce $\psi(x,y,z,t)$ nemá (zatím?) žádný fyzikální smysl, fyzikální smysl má funkce $|\psi(x,y,z,t)|^2$, která udává pravděpodobnost detekce částice v malém objemu se středem v bodě $[x,y,z]$ v čase *t*.
$\Rightarrow$ Kvantová mechanika rezignuje na určování jistého stavu, zabývá se určováním pravděpodobností:

- můžeme předpovědět s jakou pravděpodobností elektron dopadne do určitého místa (jak bude vypadat interferenční obrazec, kde se dopady elektronů více vyvolá fotografický papír, kam umístit detektor, aby do něj dopadalo hodně elektronů),
- nemůžeme (ani teoreticky) předpovědět, kam dopadne konkrétní elektron.

Dodatek: Více o pravděpodobnostní podstatě kvantové fyziky na konci příští hodiny.

Jak vlnovou funkci nalézt?
Vlnová funkce musí splňovat **Schrödingerovu rovnici**.

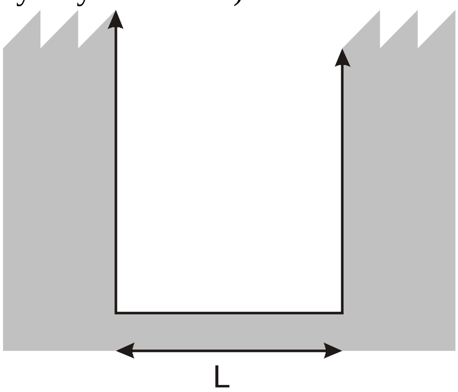
Příklad Schrödingerovy rovnice pro částici pohybující se v jednom směru *x*, kde působící síla, kterou můžeme popsat pomocí jí způsobené potenciální energie $E_p(x)$:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar}\left[E-E_p(x)\right]\psi=0\,.$$

$\Rightarrow$ Zkoušíme dosazovat různé funkce a hledáme tu, pro kterou rovnice vyjde.

Dodatek: Matematicky vzato je Schrödingerova rovnice diferenciální rovnicí druhého řádu. Řeší se tedy odpovídajícím způsobem, který ovšem k hádání nemá příliš daleko, nalezení výsledků je samozřejmě podstatně ulehčeno tím, že z tvaru rovnice je možné poznat, jaký druh funkcí je třeba zkoušet.

Konkrétní řešení jednoduchého příkladu: Nekonečná hluboká jednorozměrná potenciálová jáma o o šířce *L* (jednorozměrná propast nebo studna s vodorovným dnem a s nekonečně vysokými stěnami).



Kde se může nacházet klasická částice? Jakou bude mít nejnižší možnou energii?
Klasická částice může se stejnou pravděpodobností stát kdekoliv na dně jámy. Pokud bude hladina nulové potenciální energie na dně jámy, bude její nejnižší možná celková energie nulová.

Co předpovídá kvantová mechanika?
Dosazováním funkcí do Schrödingerovy rovnice bychom zjistili, že stav elektronu je popsán vlnovou funkcí:

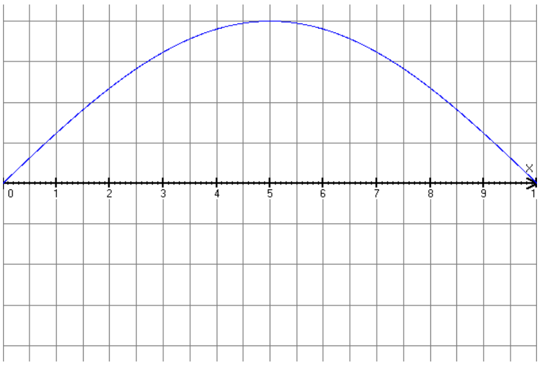
- $\psi_n(x)=0$, pro $x\in(-\infty;0)\cup(L;\infty)$,
- $\psi_n(x)=A\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right); n\in 1;2;3;4;...$ pro $x\in\langle 0;L\rangle$.

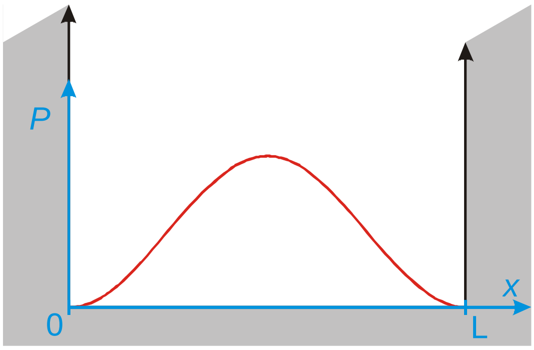
$\Rightarrow$ Elektron se může uvnitř jámy nacházet v několika různých stavech podle toho, jaké číslo dosadíme za proměnnou *n*.

***n* - kvantové číslo**, rozlišuje různé stavy, ve kterých se může elektron nacházet (kvantové číslo již známe z Bohrova modelu atomu).
Ve složitějších situacích jsou stavy částic popsány složitějšími funkcemi s větším počtem kvantových čísel.

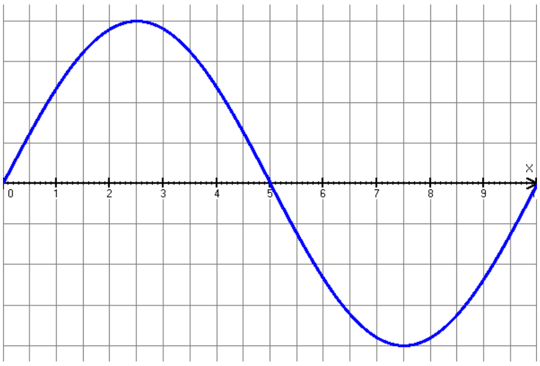
Př. 1: Napiš funkce, které popisují elektron pro $n = 1; 2; 5; 20$ pro potenciálovou jámu o šířce 100 (jednotek, například pm). Napiš funkce, které popisují pravděpodobnost nalezení elektronu.

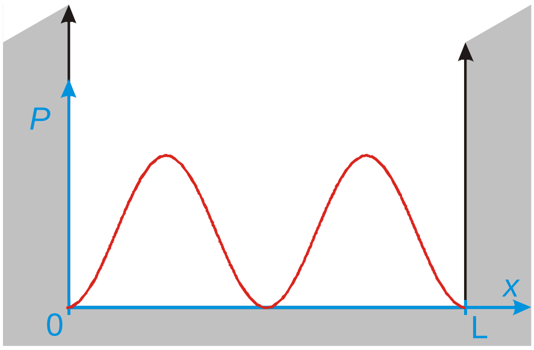
n	Vlnová funkce $\psi_n(x)$	Rozložení pravděpodobností $\lvert\psi(x)\rvert^2$
1	$A\sin\left(\frac{\pi}{100}x\right)$	$A^2\sin^2\left(\frac{\pi}{100}x\right)$



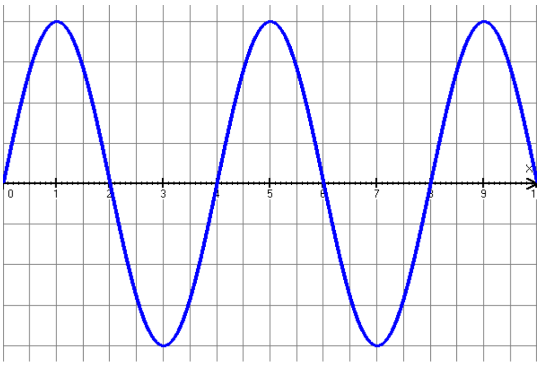


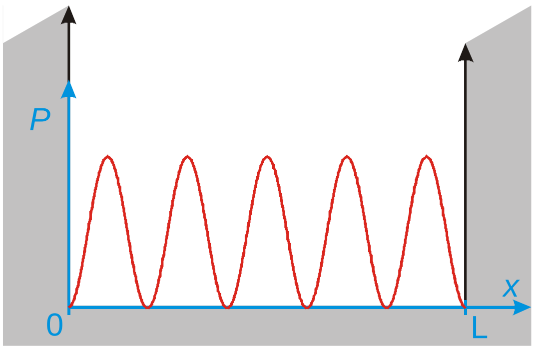
n	Vlnová funkce $\psi_n(x)$	Rozložení pravděpodobností $\lvert\psi(x)\rvert^2$
2	$A\sin\left(\frac{2\pi}{100}x\right)$	$A^2\sin^2\left(\frac{2\pi}{100}x\right)$



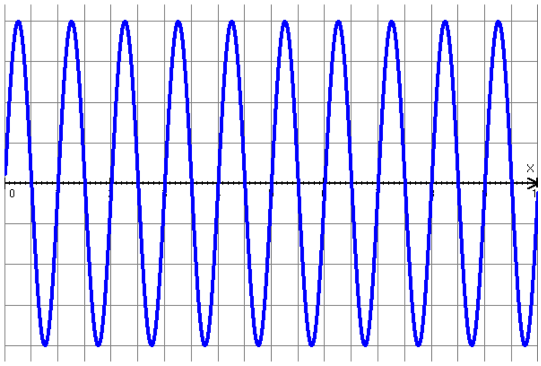


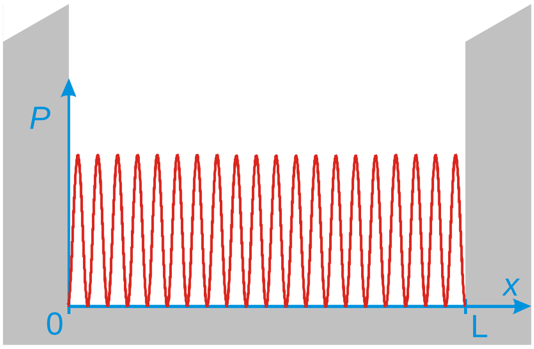
n	Vlnová funkce $\psi_n(x)$	Rozložení pravděpodobností $\lvert\psi(x)\rvert^2$
5	$A\sin\left(\frac{5\pi}{100}x\right)$	$A^2\sin^2\left(\frac{5\pi}{100}x\right)$





n	Vlnová funkce $\psi_n(x)$	Rozložení pravděpodobností $\lvert\psi(x)\rvert^2$
20	$A\sin\left(\frac{20\pi}{100}x\right)$	$A^2\sin^2\left(\frac{20\pi}{100}x\right)$





V levém sloupci vidíme, že jednotlivé vlnové funkce jsou shodné s rovnicemi, které popisují stojaté vlnění struny s oběma pevnými konci.

V pravém sloupci vidíme, že rozložení pravděpodobnosti se s rostoucí hodnotou kvantového čísla stává rovnoměrnějším. $\Rightarrow$ Se zvětšujícími se hodnotami kvantových čísel se výsledky kvantové mechaniky blíží výsledkům klasické mechaniky.

Vlnová funkce popisuje stav částice $\Rightarrow$ musí popisovat i hodnoty veličin (například energie). Jak tyto hodnoty z funkce získáme?

Každá veličina má operátor (příkladem operátoru je například umocnění na druhou, odmocnění, vynásobení číslem, ...), jehož uplatněním na funkci získáme hodnoty veličiny.

Operátor energie (hamiltonián) v jednorozměrném případě: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$.

$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_n(x) = E\cdot\psi_n(x)$ Dosadíme: $\psi_n(x) = A\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[A\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\right] = E\cdot A\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot A\cdot\left[-\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\cdot\frac{n^2\pi^2}{L^2}\right] = E\cdot A\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\cdot A\cdot\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\cdot\frac{n^2\pi^2}{L^2} = E\cdot A\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

$\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{n^2\pi^2}{L^2} = E \Rightarrow$ každé hodnotě kvantového čísla n odpovídá jiná hodnota energie E_n.

$$E_n = \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2\frac{n^2\pi^2}{2mL^2} = \frac{h^2n^2\pi^2}{4\cdot\pi^2 2mL^2} = \frac{h^2n^2}{8mL^2}$$

Př. 2: Vysvětli pomocí principu neurčitosti.
a) Proč nemůže být nejnižší energie elektronu nulová?
b) Proč musí být ve vztahu pro energii stavu šířka potenciálové jámy ve jmenovateli?

a) Proč nemůže být nejnižší energie elektronu nulová?

Nulová energie elektronu $\Rightarrow$ nulová kinetická energie $\Rightarrow$ nulová hybnost $\Rightarrow$ nulová neurčitost v určení hybnost. Podle relace neurčitosti však neurčitost hybnosti nikdy nulová být nemůže.

b) Proč musí být ve vztahu pro energii stavu šířka potenciálové jámy ve jmenovateli?
Šířka potenciálové jámy nám udává neurčitost polohy elektronu $\Rightarrow$ snižováním šířky jámy snižujeme neurčitost polohy $\Rightarrow$ musí se zvětšovat neurčitost hybnosti a tedy i kinetická energie elektronu.

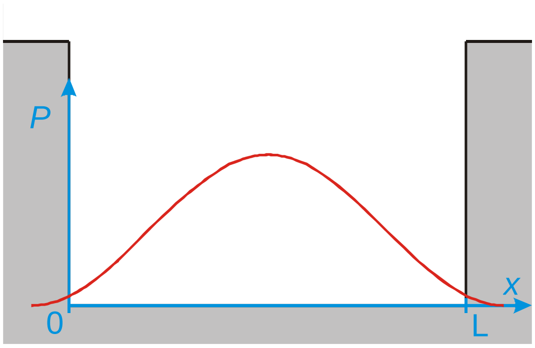
Potenciálová jáma konečné hloubky
Nekonečná potenciálová jáma je nejjednodušší, ale příliš idealizovaný příklad. Co se stane, když jáma nebude nekonečně hluboká (a bude mít konečnou hloubku, například 30 eV)?

Energetické spektrum
S rostoucí hodnotou kvantového čísla *n* roste energie elektronu $\Rightarrow$ pro dostatečně velké hodnoty *n* bude energie elektronu větší než hloubka potenciálové jámy $\Rightarrow$ elektron může z jámy uniknout $\Rightarrow$ získáme dva typy vlnových funkcí:

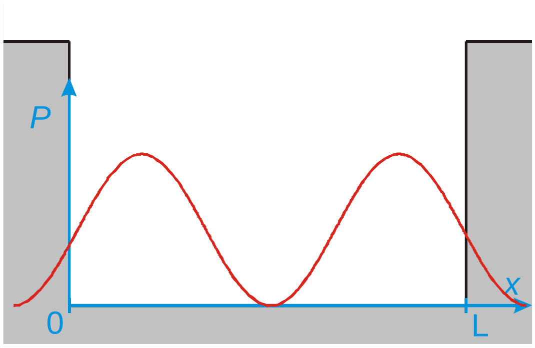
- Spojité spektrum: Pokud je energie elektronu větší než hloubka potenciálové jámy, elektron z ní unikne a může se volně pohybovat prostorem $\Rightarrow$ elektron může nabývat všech hodnot energie větších než 30 eV.
- Diskrétní spektrum: Pokud je energie elektronu menší než hloubka potenciálové jámy, se nachází v podobné situaci jako u nekonečné potenciálové jámy $\Rightarrow$ elektron může nabývat jen některých hodnot energie které odpovídají jeho možným vlnovým funkcím (složitějším než u nekonečně hluboké jámy).

Uvnitř potenciálové jámy o šířce 100 pm a hloubce 30 eV se elektron může nacházet pouze ve tech stavech s hodnotami energie 2,9 eV, 11,6 eV a 24,5 eV.

$n = 1$, $E_1 = 2{,}9\,\mathrm{eV}$



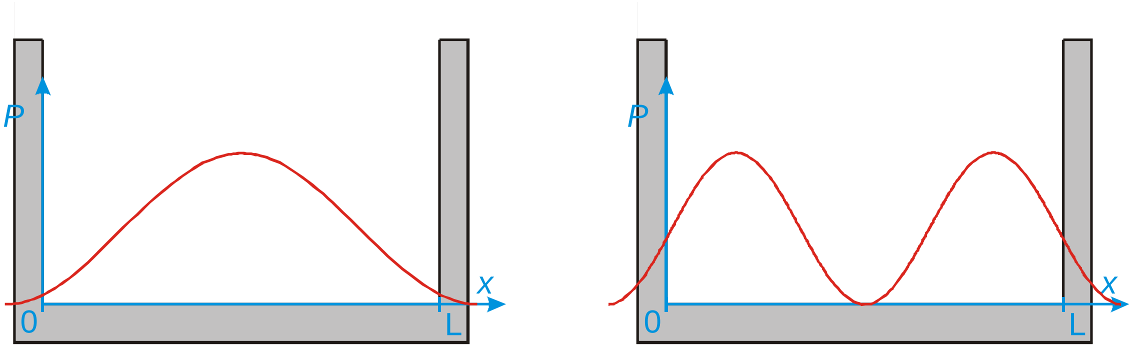
$n = 2$, $E_1 = 11{,}6\,\mathrm{eV}$



Zásadní odlišnost od klasické fyziky: Elektron se s nenulovou pravděpodobností může nacházet i v místech, kde je bariéra („prosakuje“ do ní).

Př. 3: Nakresli rozložení pravděpodobnosti v případě, že elektron se nenachází uvnitř potenciálové jámy, ale pouze uvnitř pasti, jejíž stěny mají konečnou výšku a konečnou tloušťku. Předpokládej, že rozložení pravděpodobnosti se podstatně nezmění.

$n = 1$, $E_1 = 2{,}9\,\mathrm{eV}$ $\qquad$ $n = 2$, $E_1 = 11{,}6\,\mathrm{eV}$



Z obrázků je vidět zajímavá věc: Ačkoliv elektron nemá dostatečnou energii, aby se dostal z pasti ven, můžeme ho najít i mimo past (na obrázku je nenulová pravděpodobnost nalezení elektronů i mimo jámu).

Jev, kdy **částice překoná bariéru, ačkoliv k jejímu překonání nemá dost energie**, nazýváme **tunelování** (tunelový jev). Tunelování je příčinou mnoha fyzikálních jevů například radioaktivních rozpadů, využívá se například u tunelovacích mikroskopů nebo tunelových diod.
Obrázky naznačují, že pravděpodobnost tunelování rychle klesá s výškou a tloušťkou stěny.

Dodatek: Pro představu hodnota pravděpodobnosti protunelování částice α z jádra uranu je řádově 10^{-38}, proto částici α, která je v jádře uvězněna, trvá i při 10^{22} pokusech za sekundu průměrně miliardy let, než se jí podaří z jádra uniknout (poločas rozpadu uranu je 4,5 miliardy let).

Dodatek: V mikrosvětě je možné pozorovat i jev k tunelování opačný – částice se může odrazit zpět od překážky, k jejímuž překonání dostatek energie má.

Jak se elektron může dostat přes zeď, když na její překonání nemá dostatek energie?

Klíč leží v další relaci neurčitosti $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$.

Elektron překonává bariéru poměrně krátký časový okamžik $\Rightarrow$ jeho neurčitost v čase Δt je velmi malá $\Rightarrow$ neurčitost jeho energie ΔE je velká a proto nemůžeme říct, zda má elektron potřebné energie opravdu málo (elektron si chybějící energii ΔE „vypůjčil“ s tím, že ji musí za čas Δt vrátit. Proto s tloušťkou bariéry, rychle klesá pravděpodobnost tunelování. Prodloužením času Δt se zmenšuje velikost vypůjčitelné energie ΔE).

Shrnutí: Stav mikročástice je popsán vlnovou funkcí, její druhá mocnina udává pravděpodobnost nalezení částice.