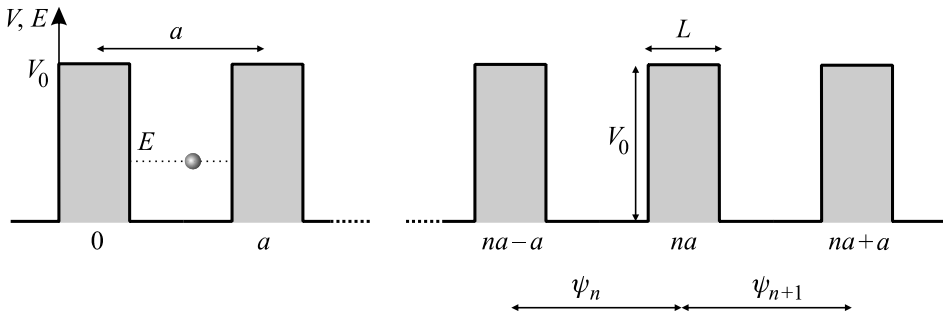


2.4.4 Periodický potenciál a pásové spektrum

Velmi častý je také pohyb částic v nelokalizovaném potenciálu, například v periodickém potenciálu krystalické mříže, který splňuje základní podmínku

$$V(x+a) = V(x), \quad (2.105)$$

kde a je perioda potenciálu. K pochopení základních vlastností periodického potenciálu postačí řešit případ nekonečné posloupnosti střídajících se jam a bariér. Tento průběh potenciálu se nazývá Kronigův-Penneyův model. Poprvé ho použili německo-americký fyzik Ralph Kronig a anglický matematik William Penney. Budeme předpokládat, že výška opakujících se bariér je V_0 , jejich šířka L a periodičita a .



Obr. 73: Kronigův-Penneyův model krystalu s periodickým potenciálem.

Kronigův-Penneyův model

Kvalitativní charakter spektra nezávisí na šířce jednotlivých bariér. Budeme je deformovat tak, aby zůstala zachována jejich plocha, tj. provedeme limitu $L \rightarrow 0$, $V_0 \rightarrow \infty$, tak, aby se součin LV_0 neměnil. Tím získáme potenciál složený z nekonečné řady Diracových impulzů a na každé bariéře postačí jedno jediné navázání vlnové funkce. Budeme tedy mít potenciál

$$V(x) = LV_0 \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \delta(x-na), \quad (2.106)$$

pro který snadno nalezneme řešení na intervalu $(na-a, na)$, kde je potenciál nulový:

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= A_n \cos[k(x-na)] + B_n \sin[k(x-na)]; \\ \psi'_n(x) &= -A_n k \sin[k(x-na)] + B_n k \cos[k(x-na)]; \\ k &\equiv 2mE/\hbar^2; \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \end{aligned} \quad (2.107)$$

Argument kmitavého řešení je vždy posunut do lokálního počátku v místě každého Diracova impulzu, takže sinus začíná u každé bariéry od nuly a kosinus od jednotky. Při navazování vlnových funkcí využijeme tři podmínky. Samotná vlnová funkce bude spojitá, první derivace bude mít skok (jde o Diracův impulz) a periodičita potenciálu povede na periodicitu hustoty pravděpodobnosti. Rozepišme nyní tyto tři podmínky pro navázání na n -tém Diracově impulzu (resp. na n -té infinitesimalní bariéře):

1. spojitost vlnové funkce

Na každé bariéře musíme předpokládat spojitost vlnové funkce. Kdyby byla nespojitá, první derivace by dala distribuci a druhá derivace obsažená ve Schrödingerově rovnici by byla derivací distribuce, kterou by nebylo možné žádným dalším členem kompenzovat. Musí tedy platit:

$$\psi_n(na) = \psi_{n+1}(na). \quad (2.108)$$

Odsud dostaneme první z výše zmíněných tří podmínek:

$$\blacktriangleright \quad A_n = A_{n+1} \cos(ka) - B_{n+1} \sin(ka). \quad (2.109)$$

2. Skok v první derivaci

Napišme Schrödingerovu rovnici v naší situaci

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V(x) \psi = E \psi. \quad (2.110)$$

Rovnici budeme integrovat v ε -okolí n -tého Diracova impulsu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{na-\varepsilon}^{na+\varepsilon} \psi''(x) dx + \int_{na-\varepsilon}^{na+\varepsilon} \delta(x-na) \psi(x) dx = \int_{na-\varepsilon}^{na+\varepsilon} E \psi(x) dx.$$

Prostřední integrál lze spočítat vzhledem k přítomnosti Diracovy distribuce velmi snadno. V ostatních provedeme limitní přechod $\varepsilon \rightarrow 0$. Integrál na pravé straně dá díky spojitosti ψ nulu a levý integrál příslušný skok:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} [\psi']_{na-\varepsilon}^{na+\varepsilon} + \psi_n(na) = 0,$$

odsud plyne podmínka pro skok první derivace ψ na n -tém Diracově impulsu

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [\psi'_{n+1}(na) - \psi'_n(na)] + \psi_n(na) = 0. \quad (2.111)$$

Po dosazení řešení (2.107) máme druhou podmínku:

$$\blacktriangleright \quad A_{n+1} \sin(ka) + B_{n+1} \cos(ka) - B_n = \frac{2mLV_0}{k\hbar^2} A_n. \quad (2.112)$$

3. Periodicita

Z periodicity potenciálu (2.105) plyne periodicita hustoty pravděpodobnosti

$$w(x+a) = w(x); \quad w(x) \equiv \psi^*(x) \psi(x). \quad (2.113)$$

Odsud je jasné, že pro vlnovou funkci musí platit

$$\psi(x+a) = e^{i\phi} \psi(x), \quad (2.114)$$

kde ϕ je nějaké fázové posunutí. Pro naše konstanty potom plyne:

$$\blacktriangleright \quad B_{n+1} = e^{i\phi} B_n; \quad A_{n+1} = e^{i\phi} A_n. \quad (2.115)$$

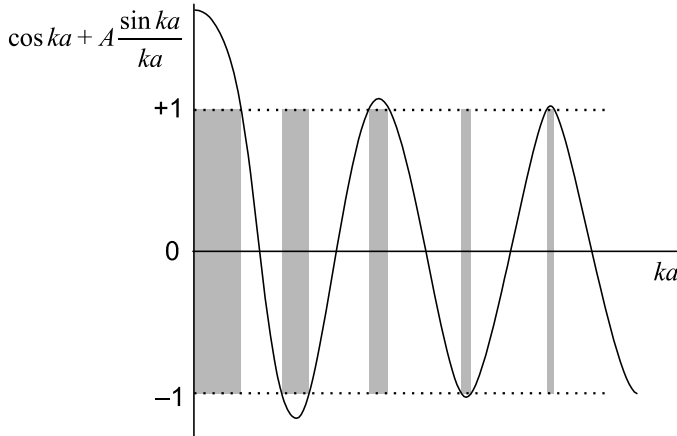
Nyní dosadíme (2.115) do podmínek (2.109) a (2.112). Tím získáme soustavu rovnic pro neznámé konstanty A_n a B_n :

$$\begin{pmatrix} e^{i\phi} \cos ka - 1, & -e^{i\phi} \sin ka \\ e^{i\phi} \sin ka - \xi, & e^{i\phi} \cos ka - 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = 0; \quad \xi \equiv \frac{2mLV_0}{k\hbar^2}. \quad (2.116)$$

Nenulové řešení získáme jen tehdy, pokud bude determinant soustavy nulový, což vede na podmínku:

$$\blacktriangleright \quad \cos \phi = \cos ka + A \frac{\sin ka}{ka}; \quad A \equiv \frac{mLaV_0}{\hbar^2}. \quad (2.117)$$

Pravá strana této podmínky musí být z intervalu $\langle -1, 1 \rangle$, jinak úhel ϕ na levé straně nelze nalézt a řešení neexistuje. Výsledkem jsou pásy, ve kterých se částice pohybovat může, a zakázané pásy, ve kterých řešení neexistuje, tj. částice s takovou energií se v periodickém potenciálu nemůže vyskytovat. Připomeňme si, že vlnový vektor \mathbf{k} je v podmínce (2.117) provázán s energií podle vztahu (2.107), tj. platí $k = 2mE/\hbar^2$.



Obr. 74: V grafu je vynesena pravá strana podmínky (2.117). Tam, kde je křivka mimo interval $\langle -1, 1 \rangle$, řešení neexistuje a na grafu je šedou barvou označen zakázaný pás.

Zakázané pásy jsou typické v krystalových mřížích, v polovodičích, ale třeba i v periodických strukturách motýlích křídel, kde způsobují zajímavé, jakoby nepřírodní barvy.

Brillouinova zóna

Představme si nyní třírozměrnou periodicitu krystalické mříže, která se opakuje při každém posunutí o vektor \mathbf{A}

$$\blacktriangleright \quad \mathbf{A} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3 \dots \quad (2.118)$$

kde \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , \mathbf{a}_3 jsou tři lineárně nezávislé vektory (neleží ve stejné rovině). Objem elementární buňky je dán objemem rovnoběžnostěnu nataženého na základní vektory mříže, tj.

$$V_Z = |\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)|. \quad (2.119)$$

Potenciál musí splňovat podmínku periodicity

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{A}). \quad (2.120)$$

Periodicita mříže se samozřejmě přenáší i na hybnost pohybující se částice, která se při průletu mříží také periodicky mění. Hybnost je vždy provázána s vlnovým vektorem, tj.

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}. \quad (2.121)$$

V k -prostoru, do kterého se přeneseme Fourierovou transformací, bude periodicita znamenat jednoduchou podmínku na rovinnou vlnu

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}} = e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{A}}, \text{ tj.} \quad (2.122)$$

$$e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{A}} = 1; \quad \Rightarrow \quad \mathbf{G} \cdot \mathbf{A} = 2N\pi; \quad N = 1, 2, 3, \dots \quad (2.123)$$

Periodicita v k -prostoru je tedy \mathbf{G} , pro energii bude například platit

$$\blacktriangleright \quad E(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = E(\mathbf{k}). \quad (2.124)$$

Vektor \mathbf{G} definuje tzv. reciprokou mříž v k -prostoru

$$\blacktriangleright \quad \mathbf{G} = m_1 \mathbf{g}_1 + m_2 \mathbf{g}_2 + m_3 \mathbf{g}_3; \quad m_1, m_2, m_3 = 1, 2, 3, \dots \quad (2.125)$$

Vektory \mathbf{g}_l jsou lineárně nezávislé (neleží v rovině) a definují reciprokou mříž. Jejich rozměr je m^{-1} . Ze vztahu (2.123) plyne, že základní vektory reciproké mříže jsou

$$\mathbf{g}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{V_Z}; \quad \mathbf{g}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{V_Z}; \quad \mathbf{g}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{V_Z}. \quad (2.126)$$

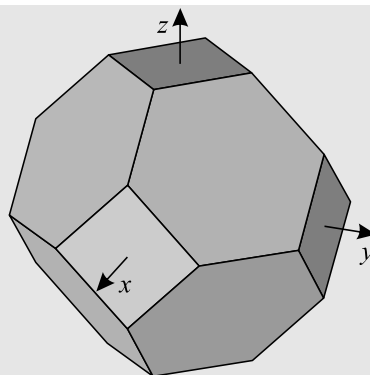
Mezi vektory \mathbf{a}_k původní mříže a \mathbf{g}_l reciproké mříže platí jednoduchý vztah

$$\mathbf{a}_k \cdot \mathbf{g}_l = 2\pi \delta_{kl}. \quad (2.127)$$

V reciproké mříži bude veškerá informace obsažena v základní buňce, kterou nazýváme *Brillouinova zóna*. Jejím nekonečným opakováním zrekonstruujeme celý k -prostor. Na hranici Brillouinových zón se veličiny mohou měnit skokem. Objem Brillouinovy zóny je dán objemem rovnoběžnostěnu nataženého na základní vektory mříže, tj.

$$V_B = |\mathbf{g}_1 \cdot (\mathbf{g}_2 \times \mathbf{g}_3)|. \quad (2.128)$$

Koncept Brillouinových zón byl vytvořen francouzským fyzikem Léonem Brillouinem (1889–1969) a stal se neodmyslitelnou součástí dnešní teorie pevných látek a zejména polovodičů. Řešení v k -prostoru je mnohdy jednodušší a usnadní práci. My jsme se zde seznámili jen s tzv. první Brillouinovou zónou. Jejím opakováním můžeme vytvářet další Brillouinovy zóny. Řešení Schrödingerovy rovnice v třírozměrném periodickém potenciálu krystalu jde za rámec této úvodní učebnice kvantové mechaniky a čtenář ho nalezne ve specializovaných knihách, viz např. [23, 24].

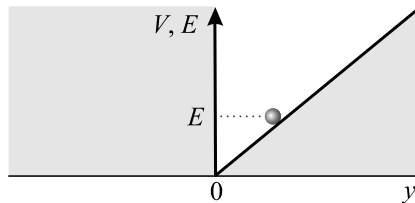


Obr. 75: Brillouinova zóna plošně centrované kubické soustavy.

2.4.5 Neutron v tíhovém poli

Gravitační interakce je nejslabší ze všech čtyř interakcí v přírodě. Snadno ji detekujeme u planet, hvězd a galaxií, ale dlouho se zdálo, že případné gravitační projevy elementárních částic jsou zcela mimo naše měřicí možnosti. V roce 2011 se podařilo týmu z Vídeňské univerzity změřit detekovat kvantové stavy neutronu v tíhovém poli. Poprvé tak byly experimentálně pozorovány gravitační projevy elementární částice.

Uvažujme částici pohybující se v homogenním tíhovém poli. Pohyb částice je zdola omezen tvrdou podložkou. Jde o kvantovou analogii ping-pongu, kdy míček může poskakovat na stole, ale nemůže se dostat pod jeho desku. Situace je nakreslena na obrázku 76. Klasický pohyb částice je omezen zdola deskou stolu a shora maximální výškou, která je dána celkovou energií částice $E = \frac{1}{2}mv^2 + mgy$. Z hlediska kvantové teorie jde o nekonečnou trojúhelníkovou jámu, ve které má částice diskontinuální energetické stavy.



Obr. 76: Kvantový pingpong.

Potenciální energie naší úlohy má tvar

$$\blacktriangleright \quad V(y) = \begin{cases} \infty; & y \leq 0, \\ mgy; & y > 0. \end{cases} \quad (2.129)$$

Schrödingerovu rovnici budeme řešit v oblasti $y > 0$ a budeme požadovat, aby $\psi(0) = 0$. Samotná rovnice má tvar

$$\blacktriangleright \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dy^2} + mgy\psi = E\psi. \quad (2.130)$$

Rovnici lze řešit obdobným postupem jako harmonický oscilátor v x reprezentaci. Nejprve zavedeme bezrozměrný argument vlnové funkce:

$$\frac{d^2\psi}{d\bar{y}^2} - \bar{y}\psi + \lambda\psi = 0; \quad \bar{y} \equiv \frac{y}{y_0}; \quad \lambda \equiv \frac{E}{mg y_0}; \quad y_0 \equiv \sqrt[3]{\frac{\hbar^2}{2m^2 g}} \quad (2.131)$$

Vlastní číslo λ je ve skutečnosti bezrozměrnou energií. Proměnnou \bar{y} ještě posuneme podle předpisu

$$\xi \equiv \bar{y} - \lambda \quad (2.132)$$

a výsledná rovnice bude

$$\blacktriangleright \quad \psi'' - \xi\psi = 0; \quad ' \equiv d/d\xi. \quad (2.133)$$

Jde o Airiho rovnici, jejímž řešením jsou Airiho funkce $Ai(\xi)$ a $Bi(\xi)$, viz například [25], [26]. Obě funkce lze definovat za pomoci řady, pomocí Besselových funkcí nebo pomocí integrálního vyjádření:

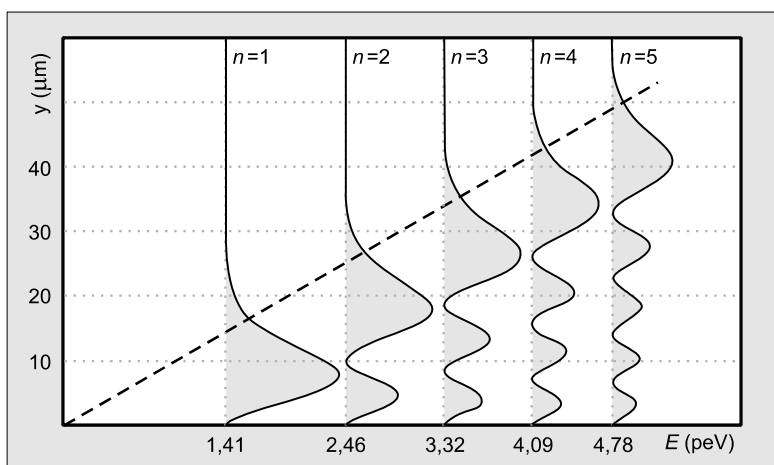
$$\text{Ai}(\xi) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos\left(t^3/3 + \xi t\right) dt ;$$

$$\text{Bi}(\xi) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \left[\exp\left(-t^3/3 + \xi t\right) + \sin\left(t^3/3 + \xi t\right) \right] dt .$$
(2.134)

Funkce $\text{Bi}(\xi)$ pro velká ξ diverguje a není integrovatelná, proto je řešením úlohy

$$\psi(\xi) = \text{Ai}(\xi) .$$
(2.135)

Okrajová podmínka $\psi(\xi) = 0$ vede na numerické hledání nulových bodů Airiho funkce a tím na kvantování energie, která je v argumentu Airiho funkce, neboť $\xi = \bar{y} - \lambda(E)$. Hodnoty prvních pěti energetických stavů spolu s hustotou pravděpodobnosti výskytu částice jsou na obrázku:



Obr. 77: Kvantový míček v tíhovém poli. Na vodorovné ose je energie míčku, vyznačeny jsou přípustné energetické stavy v kvantové teorii. Na svislé ose je výška nad podložkou. Přerušovanou čarou je znázorněna výška, které by poskakující míček s danou energií dosáhl v klasické mechanice. Šedě je vyznačena kvantová pravděpodobnost výskytu míčku (její hodnota narůstá směrem doprava).

Kvantový pingpong s neutronem

Experimenty s tíhovým polem působícím na elementární částice prováděla skupina vědců pod vedením profesora Hartmuta Abeleho z Vídeňské technické univerzity [27]. Součástí skupiny byli i vědci z Laueho-Langevinova ústavu v Grenoblu (ILL, Institute Laue-Langevin), kde byly experimenty fyzicky prováděny. Jako testovací míček posloužil neutron, který je minimálně ovlivňován všudypřítomnými elektromagnetickými silami. Neutron je velmi obtížně polarizovatelný, takže na něho nepůsobí ani různé dipólové síly, jako je například van der Waalsova síla. Neutron má pro experimenty s gravitací dostatečnou životnost, jeho poločas rozpadu je přes 800 sekund. K experimentům byl použit zdroj ultrachladných neutronů s velmi nízkou energií. Jedině u takových částic bylo možné měřit kvantové stavy neutronu v tíhovém poli. Proto byl použit zdroj neutronů z Laueho-Langevinova ústavu v Grenoblu, který vytváří neutrony s ener-

gií nižší než 300 neV (nanoelektronvoltů), tomu odpovídá teplota nižší než 2 mK (miliKelviny) a rychlost nižší než 15 m/s.

Pokud poskakuje na stole míček, může se dostat do libovolné výšky dané jeho celkovou energií. Kvantový míček v tíhovém poli se nachází jen v určitých energetických stavech daných našim řešením Schrödingerovy rovnice. Kvantový míček vystoupá jen do určitých výšek daných možnými energetickými stavy. Nejnižší energetický stav pro poskakující míček je 1,41 peV (pikoelektronvoltů), druhý 2,46 peV, třetí 3,32 peV atd. Pro normální pinpongový míček jsou tyto stavy neměřitelné, pro ultrachladné neutrony je možné takové stavy detekovat. Pravděpodobnost výskytu míčku v určité výšce nad podložkou je dána kvadrátem Airiho funkce.

Ultrachladné neutrony byly nasměrovány mezi dvě vodorovné desky. Spodní deska sloužila jako podložka, od které se neutron, pohybující se v klasickém případě po oblouku, může odrazit. Horní deska byla pomocná a byla zkonstruována tak, aby pohltila neutrony, které se dostaly až do její výšky. Vzdálenost mezi deskami byla přibližně 20 až 25 mikrometrů, takže neutrony v prvním a druhém kvantovém stavu mohly bez problémů prolétnout mezi deskami (nedosáhly výšky druhé desky). Chladné neutrony to ale neměly tak jednoduché. Spodní deska totiž vibrovala řízeným způsobem. Byla rozkmitána za pomoci piezoelektrického jevu a její kmity byly přesně kontrolovány za pomoci laseru. Pokud deska vibrovala, způsobila rezonanční přeskok neutronů mezi prvním a třetím energetickým stavem a většina neutronů mezi deskami neprolétla, protože třetí energetický stav znamená, že se neutron dostal až do výšky horní desky a byl jí absorbován. Pokud dolní deska nevíbrovala, většina neutronů mezi deskami prošla.

Historicky poprvé byly měřeny kvantové stavy částice v gravitačním poli a bylo možné tyto stavy změnit za pomoci vibrující destičky. Tato rezonanční metoda může mít zcela zásadní vliv na poznání gravitační interakce na malých měřítkách, kde dosud chyběla jakákoli měření. Máme vysokou šanci se dozvědět, jak gravitace funguje ve světě elementárních částic a zda se skutečnost odchyluje od Newtonových a Einsteino- vých představ, či nikoli.

