Kvantová teorie – příklady 9

1. Komutační relace

Zadání: Nalezněte komutační relaci mezi operátorem násobení souřadnicí a operátorem derivování.

Řešení: Přímo z definice komutátoru nalezneme výsledek:

$$[x, \mathrm{d}/\mathrm{d}x]\, f = (x\, \mathrm{d}/\mathrm{d}x - \mathrm{d}/\mathrm{d}x\, x)\, f = x\, \mathrm{d}f/\mathrm{d}x - \mathrm{d}/\mathrm{d}x\,(xf) = x\, \mathrm{d}f/\mathrm{d}x - f - x\, \mathrm{d}f/\mathrm{d}x = -f\,.$$

Porovnáme-li první a poslední výraz, zjistíme:

$$[x, \mathrm{d}/\mathrm{d}x] = -1.$$

2. Bohrův model atomu vodíku

Zadání: Určete poloměr první kruhové dráhy elektronu a jeho rychlost na této dráze podle Bohrova modelu atomu vodíku.

Řešení: Pohyb elektronu kolem jádra atomu vodíku na n-té kvantové dráze je centrálním pohybem, jehož příčinou je dostředivá síla, způsobená coulombovským přitahováním mezi kladně nabitým protonem a záporně nabitým elektronem. Z rovnosti coulombovské a dostředivé síly dostáváme

$$m_e \frac{v^2}{r_n} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{r_n^2}\,.$$

Z Bohrovy kvantové podmínky pro stacionární stavy $m_e v r_n = n\hbar$ vyjádříme rychlost elektronu**.** Dosazením této rychlosti do rovnice pro rovnováhu sil určíme poloměr n-té kvantové dráhy

$$r_n = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} n^2\,.$$

Po dosazení numerických hodnot dostaneme pro $n = 1$ dostaneme

$$r_1 = 0{,}53 \times 10^{-10}\ \mathrm{m}\,.$$

Pro rychlost elektronu na této dráze pak dostáváme

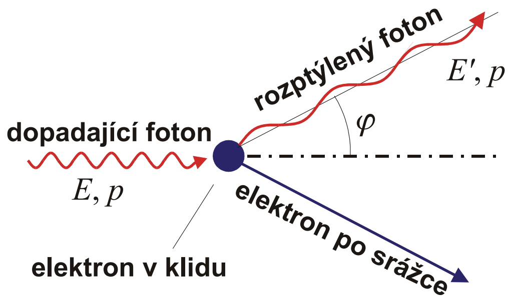
$$v_1 = \frac{h}{2\pi r_1 m_e} = \frac{e^2}{2\varepsilon_0 h} = 2{,}18 \times 10^6\, \mathrm{ms}^{-1}\,.$$

3. Comptonův jev

Zadání: Odvoďte výraz pro posuv vlnové délky $\Delta\lambda$ rentgenového záření na volných elektronech atomů v závislosti na úhlu rozptylu φ (Comptonův jev).

Řešení: Vzhledem k tomu, že energie rentgenových paprsků je velká, můžeme při výpočtu zanedbat kinetickou a potenciální energii elektronu v atomu a považovat elektrony za volné částice v klidu. Proto také položíme počáteční energii a hybnost elektronu rovny nule. Výpočet je třeba provést relativisticky, neboť elektron může po srážce nabýt vysokých energií a potom je třeba respektovat závislost jeho hmotnosti na rychlosti.

Srážka fotonu s energií $E = \hbar\omega$ a hybností $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ se stacionárním elektronem s klidovou energií $W_0 = m_0 c^2$ je ukázána na obrázku. Úhel rozptylu je označen φ.



Foton má po srážce energii $E' = \hbar\omega'$ a hybnost $\mathbf{p}' = \hbar\mathbf{k}'$. Kinetická energie elektronu se po srážce s fotonem změní. K vyřešení úlohy použijeme zákon zachování hybnosti a zákon zachování energie v relativistickém tvaru.
Relativistický tvar zákona zachování energie:
Energie dopadajícího fotonu = energie rozptýleného fotonu + kinetická energie elektronu, tedy

$$\hbar\omega = \hbar\omega' + m_0 c^2 \left[\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} - 1 \right], \qquad \text{kde } \beta = \frac{v}{c}.$$

Po substituci za
$$\frac{\hbar}{m_0 c^2} = a, \tag{1}$$

dostáváme po malé úpravě

$$a(\omega - \omega') = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} - 1. \tag{2}$$

Umocníme-li tuto rovnici, obdržíme

$$a^2\left(\omega^2 - 2\omega\omega' + \omega'^2\right) = \frac{1}{1-\beta^2} - \frac{2}{\sqrt{1-\beta^2}} + 1. \tag{3}$$

Hybnost elektronu po srážce je

$$\mathbf{p}_e = \frac{m_0 \mathbf{v}}{\sqrt{1-\beta^2}}. \tag{4}$$

Zákon zachování hybnosti pro srážku fotonu s elektronem má tvar

$$\hbar\mathbf{k} = \hbar\mathbf{k}' + \frac{m_0 \mathbf{v}}{\sqrt{1-\beta^2}}.$$

Tuto vektorovou rovnici můžeme přepsat pomocí kosinové věty

$$p^2 = (\hbar k)^2 + (\hbar k')^2 - 2\hbar^2 k k' \cos\varphi.$$

Dosazením za p z rovnice (4) a s uvážením vztahu $|\mathbf{k}| = \dfrac{\omega}{c}$ dostáváme

$$\left(\frac{m_0 v}{\sqrt{1-\beta^2}} \right)^2 = \hbar^2 \frac{\omega^2}{c^2} + \hbar^2 \frac{\omega'^2}{c^2} - 2\hbar^2 \frac{\omega\omega'}{c^2} \cos\varphi.$$

S ohledem na substituci danou rovnicí (1) potom máme

$$\frac{\beta^2}{1-\beta^2} = a^2\left(\omega^2 + \omega'^2 - 2\omega\omega'\cos\varphi\right). \tag{5}$$

Odečteme-li nyní rovnici (3) od rovnice (5), obdržíme

$$a^2\left(-2\omega\omega'\cos\varphi + 2\omega\omega'\right) = \frac{\beta^2}{1-\beta^2} - \frac{1}{1-\beta^2} + \frac{2}{\sqrt{1-\beta^2}} - 1.$$

Tato rovnice může být upravena do tvaru

$$2a^2\omega\omega'\sin^2\frac{\varphi}{2} = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} - 1. \tag{6}$$

Z porovnání rovnic (6) a (2) plyne

$$2a^2\omega\omega'\sin^2\frac{\varphi}{2} = a\left(\omega - \omega'\right)$$

S ohledem na rovnici (1) potom dostáváme

$$\omega - \omega' = 2\frac{\hbar}{m_0c^2}\omega\omega'\sin^2\frac{\varphi}{2}.$$

S uvážením vztahu $\omega = 2\pi\frac{c}{\lambda}$ nakonec dostáváme pro posuv vlnové délky $\Delta\lambda$

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{4\pi\hbar}{m_0c}\sin^2\frac{\varphi}{2} = \frac{h}{m_0c}\left(1 - \cos\varphi\right).$$

Povšimněte si, že $\Delta\lambda$ závisí pouze na úhlu rozptylu φ a nikoliv na počáteční vlnové délce. Konstanta $\lambda_C = \frac{h}{m_0c} = 2{,}43\times10^{-12}$ m, která se nazývá Comptonova vlnová délka, má základní význam v relativistické teorii elektronu. Její znalost umožňuje například určení Planckovy konstanty.

4. De Brogliova vlna

Zadání: Určete vlnovou délku de Brogliovy vlny elektronu, který byl urychlen průchodem potenciálním rozdílem $U = 100\text{V}$.

Řešení: Rychlost elektronu určíme z jeho kinetické energie

$$\frac{1}{2}m_ev^2 = eU.$$

Dostáváme

$$v = \sqrt{\frac{2eU}{m_e}} = \sqrt{\frac{2\times1{,}6\times10^{-19}\times100}{9{,}1\times10^{-31}}} = 5{,}9\times10^6\ \text{ms}^{-1}.$$

Hybnost elektronu tedy je

$$p = m_e v = 5{,}4\times10^{-24}\ \text{kg}\,\text{m}\,\text{s}^{-1}.$$

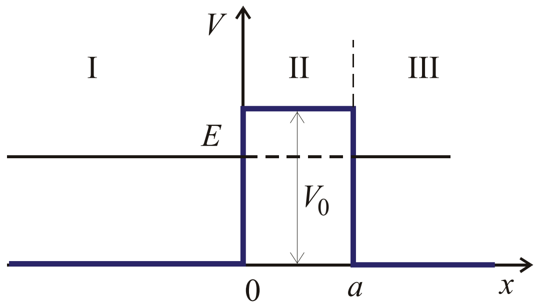
Vlnová délka de Brogliovy vlny je

$$\lambda = \frac{h}{m_ev} = \frac{6{,}6\times10^{-34}}{5{,}4\times10^{-24}} = 1{,}2\times10^{-10}\ \text{m}.$$

Povšimněte si, že tato vlnová délka je řádově stejně velká jako poloměr vodíkového atomu.

5. Bariéra

Zadání: Svazek částic o hmotnosti m a energii E dopadá na potenciálovou bariéru (viz obrázek). Energie částic E je menší než výška potenciálové bariéry V_0. Nalezněte rozložení hustoty pravděpodobnosti výskytu částic pro oblast před bariérou, uvnitř bariéry a za bariérou. Odhadněte koeficient propustnosti částic bariérou.



Řešení: Rozložení potenciálu pro potenciálovou bariéru můžeme popsat následujícím způsobem

$V = V_0$ pro $0 \le x \le a$

$V = 0$ pro $x < 0$ a pro $x > a$.

Předpokládejme, že se částice nacházejí v oblasti $x < 0$ a pohybují se podél osy x zleva doprava. Vzhledem k tomu, že výška bariéry je větší než je energie částic, potom podle zákonů klasické fyziky částice nemohou bariérou proniknout a přejít do oblasti $x > a$. Ukážeme však, že zákony kvantové mechaniky tento průnik do klasicky zakázané oblasti $x > a$ povolují.

Řešení Schrödingerovy rovnice

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V_0\right)\psi = 0 \tag{1}$$

rozdělíme do tří oblastí, ve kterých je potenciální energie konstantní

$x < 0$ vlevo od bariéry,

$0 \le x \le a$ uvnitř bariéry, a

$x > a$ napravo od bariéry.

V oblasti vlevo a napravo od bariéry se rovnice (1) zjednoduší na rovnici pro volnou částici o energii E

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\,\psi = 0\,. \tag{2}$$

Řešení této diferenciální rovnice druhého řádu s konstantními koeficienty je

$$\psi_I = A_1\,\mathrm{e}^{jk_1x} + B_1\,\mathrm{e}^{-jk_1x}\,, \quad \text{pro} \quad x < 0, \tag{3}$$

a

$$\psi_{III} = A_3\,\mathrm{e}^{jk_1x} + B_3\,\mathrm{e}^{-jk_1x}\,, \quad \text{pro} \quad x > a, \tag{4}$$

kde

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\ : \tag{5}$$

V rovnicích (3) a (4) členy s e^{jk_1x} představují rovinnou vlnu, která se šíří v kladném směru osy x a členy s e^{-jk_1x} představují rovinnou vlnu, která se šíří v záporném směru osy x. Vzhledem k tomu, že v oblasti uvnitř bariéry ($0 \le x \le a$) je $E < V_0$, můžeme rovnici (1) přepsat do tvaru

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}\left(V_0 - E\right)\psi_{II} = 0\ . \tag{6}$$

Označíme-li

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}\ , \tag{7}$$

potom řešení Schrödingerovy rovnice je

$$\psi_{II} = A_2\, e^{-k_2 x} + B_2\, e^{k_2 x}\ . \tag{8}$$

Konstanty A_1, A_2, A_3, B_1, B_2 *a* B_3 musí být zvoleny v souhlase se standardními podmínkami, vlnová funkce $\psi(x)$ a její první derivace $d\psi(x)/dx$ v bodech $x = 0$ a $x = a$ musí být spojité. S ohledem na to, že částice dopadají na bariéru zleva, potom se v oblasti napravo od bariéry může vyskytovat pouze prošlá vlna a nikoliv vlna odražená. V této oblasti již totiž neexistuje žádná příčina pro odraz vlnění. Ve vlnové funkci ψ_{III} tudíž můžeme položit $B_3 = 0$. Z podmínek spojitosti $\psi(x)$ a $d\psi(x)/dx$ pro body $x = 0$ a $x = a$ získáme čtyři rovnice pro určení konstant A_1, A_2, A_3, B_1, a B_2

$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$: $$1 + B_1 = A_2 + B_2\ , \tag{9}$$

$\psi_I(a) = \psi_{II}(a)$: $$A_2\, e^{-k_2 a} + B_2\, e^{k_2 a} = A_3\, e^{jk_1 a}\ , \tag{10}$$

$\dfrac{d\psi_I(0)}{dx} = \dfrac{d\psi_{II}(0)}{dx}$: $$k_1(1 - B_1) = k_2(A_2 - B_2)\ , \tag{11}$$

$\dfrac{d\psi_{II}(a)}{dx} = \dfrac{d\psi_{III}(a)}{dx}$: $$-A_2 e^{-k_2 a} + B_2 e^{k_2 a} = \frac{jk_1}{k_2} A_3\, e^{jk_1 a}\ . \tag{12}$$

Výše uvedenou soustavu rovnic lze použít k určení A_2, A_3, B_1, *a* B_2 v závislosti na A_1. Konstanta A_1, vyjadřující amplitudu dopadající rovinné vlny, může být zvolena libovolně. Položme proto $A_1 = 1$.
Koeficient propustnosti T určíme jako poměr toku hustoty pravděpodobnosti částic prošlých bariérou k toku hustoty pravděpodobnosti částic na bariéru dopadajících. Tok hustoty pravděpodobnosti částic na bariéru dopadajících je definován jako

$$I_{dop} = \frac{\hbar k_I}{m}\,|A_1|^2\ .$$

Podobně definujeme i tok hustoty pravděpodobnosti částic prošlých bariérou

$$I_{proš} = \frac{\hbar k_I}{m}|A_3|^2\ .$$

Pro koeficient propustnosti tedy dostáváme

$$T = \frac{I_{dop}}{I_{proš}} = |A_3|^2\ .$$

Z uvedeného výrazu je zřejmé, že pro určení koeficientu propustnosti částic je nutné určit konstantu A_3. Tato konstanta může být určena ze soustavy rovnic (9)–(12) například použitím Cramerova pravidla. K tomu účelu tyto rovnice přepíšeme do tvaru

$$\begin{array}{rcccccccl}
B_1 & - & A_2 & - & B_2 & + & 0 & = & -1 \\
-k_1 B_1 & - & k_2 A_2 & + & k_2 B_2 & + & 0 & = & -k_1 \\
0 & + & e^{-k_2 a} A_2 & + & e^{k_2 a} B_2 & - & e^{jk_1 a} A_3 & = & 0 \\
0 & + & e^{-k_2 a} A_2 & - & e^{k_2 a} B_2 & + & \dfrac{jk_1}{k_2} e^{jk_1 a} A_3 & = & 0
\end{array} \tag{13}$$

Determinant soustavy je

$$D_S = \begin{vmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ -k_1 & -k_2 & k_2 & 0 \\ 0 & e^{-k_2 a} & e^{k_2 a} & -e^{jk_1 a} \\ 0 & e^{-k_2 a} & -e^{k_2 a} & \frac{jk_1}{k_2} e^{jk_1 a} \end{vmatrix} .$$

Výpočtem dostáváme

$$D_S = e^{jk_1 a}\left[2k_1\left(e^{k_2 a} + e^{-k_2 a}\right) + j\left(e^{k_2 a} - e^{-k_2 a}\right)\left(\frac{k_2^2 - k_1^2}{k_2}\right)\right].$$

Pro určení konstanty A_3 je nutné vypočítat determinant, který vznikne z determinantu soustavy D_S tak, že jeho čtvrtý sloupec zaměníme sloupcem pravých stran soustavy rovnic (13). Máme tedy

$$D_{A_3} = \begin{vmatrix} 1 & -1 & -1 & -1 \\ -k_1 & -k_2 & k_2 & -k_1 \\ 0 & e^{-k_2 a} & e^{k_2 a} & 0 \\ 0 & e^{-k_2 a} & -e^{k_2 a} & 0 \end{vmatrix} = 4\,k_1.$$

Pro konstantu A_3 dostáváme

$$A_3 = \frac{D_{A_3}}{D_S} = \frac{4k_1 jk_2 e^{-jk_1 a}}{e^{k_2 a}\left(k_1 + jk_2\right)^2 - e^{-k_2 a}\left(k_1 - jk_2\right)^2} .$$

Koeficient propustnosti částic bariérou tudíž je

$$T = \left|A_3\right|^2 = \frac{4k_1^2 k_2^2}{\left(k_1^2 + k_2^2\right)^2 \sinh^2 k_2 a + 4k_1^2 k_2^2} .$$

Vzhledem k tomu, že v reálných podmínkách často platí že $k_2 a >> 1$, může být výraz pro T zjednodušen do tvaru

$$T = \frac{16k_1^2 k_2^2}{\left(k_1^2 + k_2^2\right)^2} e^{-2k_2 a} = T_0\, e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}} . \qquad (14)$$

Z uvedené závislosti je patrné, že pravděpodobnost průchodu částice potenciálovou bariérou - tzv. tunelový jev - je prakticky různá od nuly jen v případě mikroskopických rozměrů potenciálové bariéry $\left(a \approx 10^{-15}\,\mathrm{m}\right)$ a hmotnosti dopadajících částic rovné hmotnosti mikročástic. Znamená to tedy, je tunelový jev je omezen pouze na oblast mikrosvěta. Uplatnění tohoto, z hlediska klasické fyziky paradoxního, chování částic je velmi široké, neboť pomocí tohoto jevu je možné vysvětlit radioaktivní α rozpad, dělení jader uranu, studenou emisi elektronů v kovu v silném elektrickém poli, jadernou fúzi atd. Rozložení hustoty pravděpodobnosti pro tunelový jev je ukázáno na obrázku.