

Příklad 1: Komutační relace $[d/dx, x]$

Mějme na \mathcal{L}^2 dva operátory: $\hat{\mathbf{D}} = d/dx$ a $\hat{\mathbf{X}} = x$, například na prvek $|x^5\rangle$ působí takto

$$\hat{\mathbf{D}}|x^5\rangle = \frac{d}{dx}x^5 = 5x^4, \quad \hat{\mathbf{X}}|x^5\rangle = x \cdot x^5 = x^6.$$

Určeme jejich komutátor

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{D}}, \hat{\mathbf{X}}]|\mathbf{f}\rangle &= (\hat{\mathbf{D}}\hat{\mathbf{X}} - \hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{D}})|\mathbf{f}\rangle = \left(\frac{d}{dx}x - x\frac{d}{dx} \right) f(x) = \frac{d}{dx}(xf(x)) - x\frac{d}{dx}f(x) = \\ &= f(x) + xf'(x) - xf'(x) = f(x) = |\mathbf{f}\rangle \Rightarrow \\ [\hat{\mathbf{D}}, \hat{\mathbf{X}}]|\mathbf{f}\rangle &= |\mathbf{f}\rangle = \text{pro } \forall |\mathbf{f}\rangle \in \mathcal{L}^2 \Rightarrow \\ &[\hat{\mathbf{D}}, \hat{\mathbf{X}}] = \hat{\mathbf{1}}. \end{aligned}$$

Podobně můžeme určovat i další komutační relace.

Příklad 2: Operátor $\mathbf{B} = i d/dx$

Ukážeme, že operátor $\hat{\mathbf{B}} = i d/dx$ na prostoru $\mathcal{L}^2(-\infty, \infty)$ je hermitovský:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{B}}\mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(i \frac{d}{dx} f(x) \right)^* g(x) dx = \\ &= -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{df^*(x)}{dx} g(x) dx \stackrel{\text{p. partes}}{=} \\ &= -i \left[f^*(x)g(x) \right]_{-\infty}^{\infty} + i \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \frac{dg(x)}{dx} dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \left(i \frac{dg(x)}{dx} \right) dx = \langle \mathbf{f} | \hat{\mathbf{B}}\mathbf{g} \rangle. \end{aligned}$$

Výraz v hranaté závorce je nulový, neboť funkce z $\mathcal{L}^2(-\infty, \infty)$ jsou integrovatelné s kvadrátem na $(-\infty, \infty)$, a proto musí platit

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} f(x) = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} g(x) = 0 \quad \text{pro } \forall f, g \in \mathcal{L}^2.$$

Samotný operátor derivace $\hat{\mathbf{D}} = d/dx$ hermitovský není, při provedení integrace per partes by se zaměnilo znaménko a platilo by

$$\langle \hat{\mathbf{D}}\mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle = - \langle \mathbf{f} | \hat{\mathbf{D}}\mathbf{g} \rangle.$$

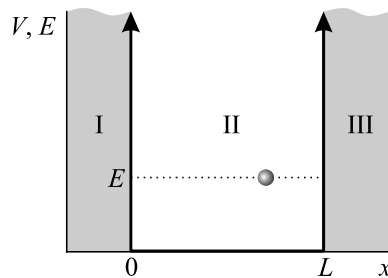
D

Příklad 3: Nekonečná jáma

Předpokládejme pohyb částice v potenciálu nekonečné pravoúhlé jámy

$$V(x) = \begin{cases} 0; & x \in (0, L), \\ \infty; & x \notin (0, L). \end{cases} \quad (1)$$

Jde samozřejmě o fyzikální idealizaci, kterou ve skutečné přírodě nenajdeme. Potenciál rozdělíme na tři oblasti podle obrázku:



Nekonečná pravoúhlá jáma.

V oblastech I a III je potenciál nekonečný a jediným možným řešením bezčasové Schrödingerovy rovnice je $\psi = 0$. Z fyzikálního hlediska to znamená, že pravděpodobnost výskytu částice mimo jámu je nulová. Kdyby byla jáma konečná (tj. konečný potenciál vně jámy), byla by vlnová funkce ψ v těsné blízkosti hranice jámy nenulová. Částice by měla sice malou, ale nenulovou pravděpodobnost existence i za hranicí jámy. V oblasti II má Schrödingerova rovnice tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, \quad (2)$$

který lze upravit na standardní rovnici kmitů v proměnné x

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0; \quad k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad (3)$$

jejíž řešení je

$$\psi = A \sin kx + B \cos kx. \quad (4)$$

Vlnová funkce musí být spojitá na obou hranicích jámy, jinak by první derivace vlnové funkce byla derivací skoku, tj. distribucí, a druhá derivace by se dokonce chovala jako derivace distribuce, což odporuje původní rovnici (2). Proto musí platit okrajové podmínky $\psi(0) = 0$, $\psi(L) = 0$, ze kterých plyne

$$B = 0; \quad k = n \frac{\pi}{L}; \quad n = 1, 2, 3 \dots \quad (5)$$

Kvantování je právě důsledkem aplikace okrajové podmínky. Hodnota k , ve které je podle vztahu (3) „zakuklena“ energie, nemůže nabývat libovolných hodnot. Podmínka (5) tedy není nic jiného než kvantovací podmínka pro energii:

$$\blacktriangleright \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2; \quad n = 1, 2, 3 \dots \quad (6)$$

Základní hladina energie je, podobně jako u harmonického oscilátoru, nenulová. Důvodem jsou opět Heisenbergovy relace neurčitosti – částice pohybující se v jámě je lokalizována v konečné oblasti a nemůže proto mít nulovou hybnost nebo energii. Na rozdíl od harmonického oscilátoru není spektrum energie ekvidistantní a s rostoucím číslem n rozdíl dvou sousedních hladin energie roste. Samotná vlnová funkce má tvar

$$\psi_n(x) = A \sin k_n x = A \sin \left(n \frac{\pi}{L} x \right). \quad (7)$$

Řešením jsou celé paprsky v Hilbertově prostoru \mathcal{L}^2 . Z nich vybereme jednotkové vektory splňující

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1 \quad \Rightarrow \quad \int_0^L A^2 \sin^2(n\pi x/L) dx = 1 \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{2}{L}}.$$

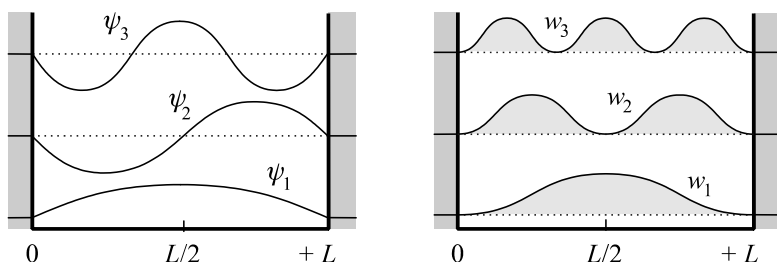
Normovací konstanta by mohla mít po odmocnění i zápornou nebo komplexní hodnotu. Vzhledem k tomu, že úkolem bylo vybrat některý z jednotkových vektorů paprsku, můžeme použít jakékoli řešení. Výsledné řešení v oblasti II tedy je

$$\blacktriangleright \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left(n \frac{\pi}{L} x \right); \quad n = 1, 2, 3 \dots \quad (8)$$

Pro pravděpodobnost výskytu částice v jámě (v oblasti II) potom máme

$$\blacktriangleright \quad w_n(x) = \psi_n^* \psi_n = \frac{2}{L} \sin^2 \left(n \frac{\pi}{L} x \right); \quad n = 1, 2, 3 \dots \quad (9)$$

Průběh prvních tří řešení naleznete na obrázku. Je zřejmé, že uvnitř nekonečné pravoúhlé jámy existují místa, kde je pravděpodobnost výskytu částice nulová (stejně jako u harmonického oscilátoru). Mimo oblast jámy se částice nevyskytuje vůbec.



Vlnové funkce (nalevo) a pravděpodobnosti (napravo) prvních tří stavů.

Pokud budeme středovat polohu přes pravděpodobnosti w_n , snadno zjistíme, že průměrná poloha částice je přesně uprostřed jámy, a to nezávisle tom, ve kterém energetickém stavu se částice nachází:

$$\blacktriangleright \quad \langle x \rangle = \int_0^L x w_n(x) dx = \int_0^L \frac{2x}{L} \sin^2\left(n \frac{\pi}{L} x\right) dx = \frac{L}{2}. \quad (10)$$

Příklad 4: Elektron v jámě

Elektron v polovodiči se nachází v elektrickém poli, jehož potenciál má tvar vysoké jámy o šířce 1 nm. Určete první tři hladiny energie. Poté řešte pro jámu s šířkou 1 mm. Naleznete energetický rozdíl mezi třetí a druhou energetickou hladinou.

Řešení: Hodnoty určíme ze vztahu (6):

šířka	E_1	E_2	E_3	ΔE_{23}
1 nm	$6 \times 10^{-20} \text{ J} = 0,38 \text{ eV}$	1,5 eV	3,4 eV	1,9 eV
1 mm	$6 \times 10^{-32} \text{ J} = 0,38 \text{ peV}$	1,5 peV	3,4 peV	1,9 peV

Pro jámu o šířce 1 nm je kvantování podstatné a hodnoty energetických hladin jsou srovnatelné s energií elektronu v atomárním obalu. Pro jámu širokou 1 mm jsou energie o mnoho řádů nižší a rozdíly mezi energetickými hladinami běžnými prostředky nepozorovatelné.



Příklad 5: Konečná jáma

Jinou aproximací potenciálového minima je konečná jáma. Jde o výhodné přiblížení například pro interakce neutronů a protonů v atomovém jádře, i když zde bychom správně měli řešit třírozměrnou konečnou jámu. Šířka jámy je v tomto případě přibližně 10^{-15} m , což je zhruba dosah silné interakce. Narozdíl od nekonečné jámy nelze spektrum energie určit analyticky. Naštěstí existuje jednoduchá geometrická metoda, která vede k nalezení spektra. Budeme předpokládat, že jáma je orientována symetricky vůči počátku souřadnicového systému, což nám usnadní závěrečný výpočet spektra. Výpočet se opět rozpadne na tři oblasti, ve kterých budeme postupovat obdobně jako u nekonečné jámy. První i druhá derivace vlnové funkce musí být na rozhraní spojitá, jinak by druhá derivace ve Schrödingerově rovnici byla nepřípustnou distribucí.

Budeme tedy řešit Schrödingerovu rovnici s potenciálem konečné jámy:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V(x) \psi = E \psi, \quad V(x) = \begin{cases} 0; & x \in (-L/2, L/2), \\ V_0; & x \notin (-L/2, L/2). \end{cases} \quad (11)$$

V jednotlivých oblastech I, II a III je potenciál konstantní a řešení je jednoduché. V oblastech I a III je řešení kombinací rostoucí a klesající exponenciály, v dané oblasti je vždy jen jedna z těchto funkcí integrovatelná s kvadrátem a druhou je nutné vyloučit (položít konstantu u ní rovnou 0). V oblasti II je řešení složené z funkcí kosinus a sinus:

$$\begin{aligned}
 \psi_{\text{I}}(x) &= C e^{hx}; & x \in \text{I}, & & h^2 &\equiv \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}; \\
 \psi_{\text{II}}(x) &= A \cos kx + B \sin kx; & x \in \text{II}, & & & \\
 \psi_{\text{III}}(x) &= D e^{-hx}; & x \in \text{III}, & & k^2 &\equiv \frac{2mE}{\hbar^2}.
 \end{aligned} \tag{12}$$

Podmínky spojitosti na levé a pravé straně jámy vedou na rovnice

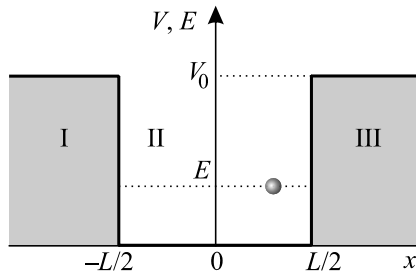
$$\begin{aligned}
 \psi_{\text{II}}(-L/2) &= \psi_{\text{I}}(-L/2); \\
 \psi_{\text{II}}(+L/2) &= \psi_{\text{III}}(+L/2); \\
 \psi'_{\text{II}}(-L/2) &= \psi'_{\text{I}}(-L/2); \\
 \psi'_{\text{II}}(+L/2) &= \psi'_{\text{III}}(+L/2).
 \end{aligned} \tag{13}$$

Po dosazení dostaneme vztahy mezi konstantami A , B , C a D :

$$\begin{aligned}
 A \cos(kL/2) - B \sin(kL/2) &= C e^{-hL/2}; \\
 A \cos(kL/2) + B \sin(kL/2) &= D e^{-hL/2}; \\
 +Ak \sin(kL/2) + Bk \cos(kL/2) &= Ch e^{-hL/2}; \\
 -Ak \sin(kL/2) + Bk \cos(kL/2) &= -Dh e^{-hL/2}.
 \end{aligned} \tag{14}$$

Nyní první dvojici rovnic sečteme a odečteme. S druhou dvojicí uděláme totéž:

$$\begin{aligned}
 2A \cos(kL/2) &= (D + C) e^{-hL/2}; \\
 2B \sin(kL/2) &= (D - C) e^{-hL/2}; \\
 2Bk \cos(kL/2) &= (C - D) h e^{-hL/2}; \\
 2Ak \sin(kL/2) &= (C + D) h e^{-hL/2}.
 \end{aligned} \tag{15}$$



Konečná potenciálová jáma.

Pokud je konstanta A různá od nuly, můžeme provést výpočet z první a poslední rovnice, pokud je různá od nuly B , z druhé a třetí rovnice:

$$\begin{aligned}
 A \neq 0 &\Rightarrow k \operatorname{tg}(kL/2) = h, \\
 B \neq 0 &\Rightarrow k \operatorname{cotg}(kL/2) = -h.
 \end{aligned} \tag{16}$$

Pokud by byly obě konstanty nenulové, dostaneme se ihned do sporu. Pokud by byly obě konstanty nulové, máme jen nulové řešení pro vlnovou funkci. V úvahu tedy přicházejí jen dvě možnosti

1. $A \neq 0, B = 0$. Podle (12) jde o řešení sudá.
2. $A = 0, B \neq 0$. Podle (12) jde o řešení lichá.

V obou případech je už snadné dopočítat z (15) konstanty C a D . Poslední konstantu A (v případě 1), resp. B (v případě 2), určíme z normovací podmínky $\langle \psi | \psi \rangle = 1$. Nás ale spíše zajímá energetické spektrum částice v konečné jámě. To je určeno podmínkami (16), které představují transcendentní rovnice. V proměnných k a h je totiž obsažena energie. První podmínka je pro sudá řešení, druhá pro lichá. Zaveďme nové proměnné

$$\xi \equiv kL/2; \quad \eta \equiv hL/2. \quad (17)$$

Obě proměnné jsou bezrozměrné a spektrální podmínky se změni na

$$\begin{aligned} \eta &= \xi \operatorname{tg} \xi; & \text{sudá řešení,} \\ \eta &= -\xi \operatorname{cotg} \xi; & \text{lichá řešení.} \end{aligned} \quad (18)$$

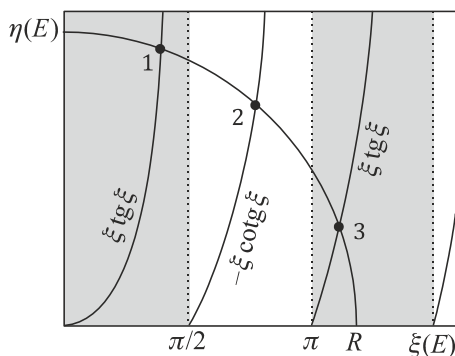
Levé strany můžeme snadno vykreslit do grafu v rovině (ξ, η) , tj. na vodorovnou osu budeme nanášet hodnoty ξ , na svislou osu hodnoty η vypočtené z pravých stran relace. Pro nové proměnné (ξ, η) platí jedna zajímavá vlastnost, která plyne z definic (12):

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{(k^2 + h^2)L^2}{4} = \frac{mV_0L^2}{2\hbar^2}.$$

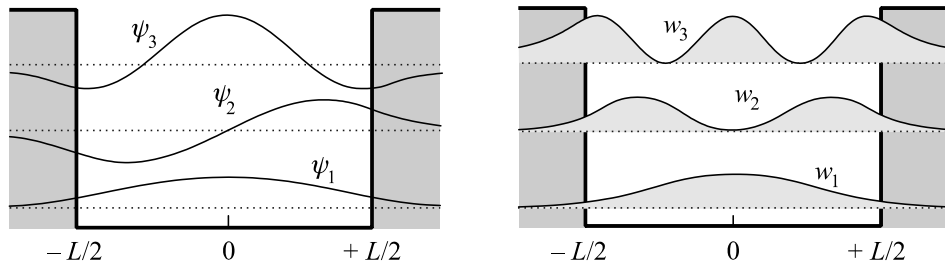
Nejde o nic jiného než o rovnici kružnice s poloměrem daným parametry jámy:

$$\xi^2 + \eta^2 = R^2; \quad R \equiv \sqrt{\frac{mV_0L^2}{2\hbar^2}}. \quad (19)$$

Průsečíky této kružnice s křivkami (18) dají grafické řešení energetického spektra



Grafické určení energetických hladin. Jsou dány průsečíky kružnice s křivkami.



Vlnové funkce (nalevo) a pravděpodobnosti (napravo) prvních tří stavů.

Na rozdíl od nekonečné jámy částice proniká i do klasicky zakázaných oblastí, tj. do oblasti $x < -L/2$ a do oblasti $x > +L/2$. Z obrázku je patrné, že hustota pravděpodobnosti je v těchto zakázaných oblastech nenulová. Vlnové funkce se střídají sudé a liché. Hustoty pravděpodobnosti jsou sudé funkce pro všechny stavy. Střední hodnota polohy částice je proto 0, tedy uprostřed jámy.

Poznámka: Pro $E < V_0$, tedy v oblasti, kde se v klasické mechanice nemůže částice vzdálit do nekonečna, je kvantové spektrum operátoru energie diskrétní. Vždy existuje alespoň jeden vázaný stav, a to i v nejplošší jámě. Pokud by částice měla $E > V_0$, tj. byla by nad jámou, bude řešení ve všech třech oblastech lineárními kombinacemi sinů a kosinů a k dispozici budeme mít 6 konstant, 4 podmínky navázání a jednu normovací podmínku. Žádná omezení typu (16) nedostaneme a spektrum bude spojité.