Přednáška III.

Hamiltonián:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

- Operátor kinetické energie jedné částice v jednorozměrným prostoru: $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$

- Operátor potenciální energie jedné částice:

1. Nejjednodušší případ je, když $\hat{V} = 0$ pro všechny prostorové proměnné *x* --- *volná částice*

$$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x) \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) = E\Psi(x) \Rightarrow \boxed{\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi(x)}$$

Dosazením do rovnice lze ukázat že jsou řešením tyto funkce:

$$\Psi_1(x) = N_1 \exp\left[\frac{i\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right] \qquad \Psi_2(x) = N_2 \exp\left[-\frac{i\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right]$$

Obě předešlé vlnové funkce navíc splňují vztahy (tj. jsou vlastními funkcemi charakteristické rovnice):

$$\hat{p}\Psi_1 = \sqrt{2mE}\,\Psi_1 \qquad \hat{p}\Psi_2 = -\sqrt{2mE}\,\Psi_2$$

a protože $E = \frac{1}{2}mv^2 \Rightarrow p = \pm mv$

Důležité: obě funkce poskytují ostré (vlastní) hodnoty pro operátor hybnosti,
potom při platnosti Heisenbergova principu neurčitosti nevíme nic o poloze částice…

Vskutku: počítáme-li hustotu pravděpodobnosti výskytu částice, dostaneme:

$$\Psi_1^*(x)\Psi_1(x) = N_1 \exp\left[\frac{i\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right] N_1 \exp\left[-\frac{i\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right] = N_1^* N_1$$

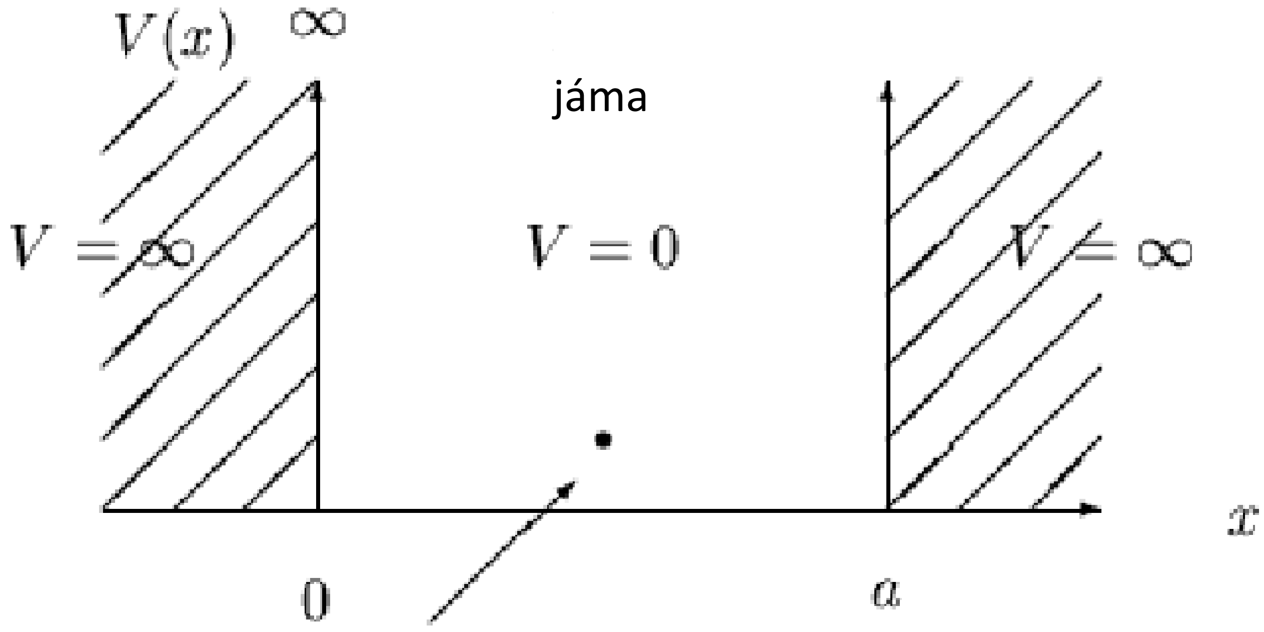
tj. hustota pravděpodobnosti výskytu částice je nezávislá na souřadnici x, což znamená, že částici je možno se stejnou pravděpodobností najít v kterémkoli místě jednorozměrného prostoru.

V souladu s Heisenbergovým principem neurčitosti!!

2. Částice v jednorozměrné parvoúhlé jámě (částice v krabici)

$\hat{V} = 0$ pro 0 < x < *a*

$\hat{V} \to \infty$ Pro ostatní oblast



Protože částice je omezená do prostoru 0 < x < *a*, pak platí

$$x \le 0 \wedge x \ge a : \Psi(x) = 0$$

=> platí okrajové podmínky:

$$\Psi(0) = 0$$
$$\Psi(a) = 0$$

Řešení je možné hledat ve tvaru:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) = E\Psi(x) \quad \Rightarrow \quad \Psi(x) = A\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) + B\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)$$

$$\Psi(x) = A\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) + B\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)$$

S přihlédnutím první okrajové podmínky:

$$\Psi(0) = A\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\cdot 0\right) + B\cos(0) = A\underbrace{\sin(0)}_{0} + B\underbrace{\cos(0)}_{1} = 0 \Rightarrow B = 0$$

$$\Psi(x) = A\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)$$

S přihlédnutím druhé okrajové podmínky:

$$\Psi(a) = A\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\cdot a\right) = \underline{A\sin(n\pi)} = 0 \Rightarrow \boxed{\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\cdot a = n\pi}$$

celočíselné násobky π vždy = 0

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\cdot a = n\pi \quad \Rightarrow \quad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \qquad n = 1,2.....$$

(vysvětlete proč *n* nezačíná od 0)

Energie částice uvězněné v potenciální jámě je kvantována!!!

To znamená, že částice může měnit svoji energii v této jámě pouze skokově:

$$\boxed{E_{n+1} - E_n = (2n+1)\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}}$$

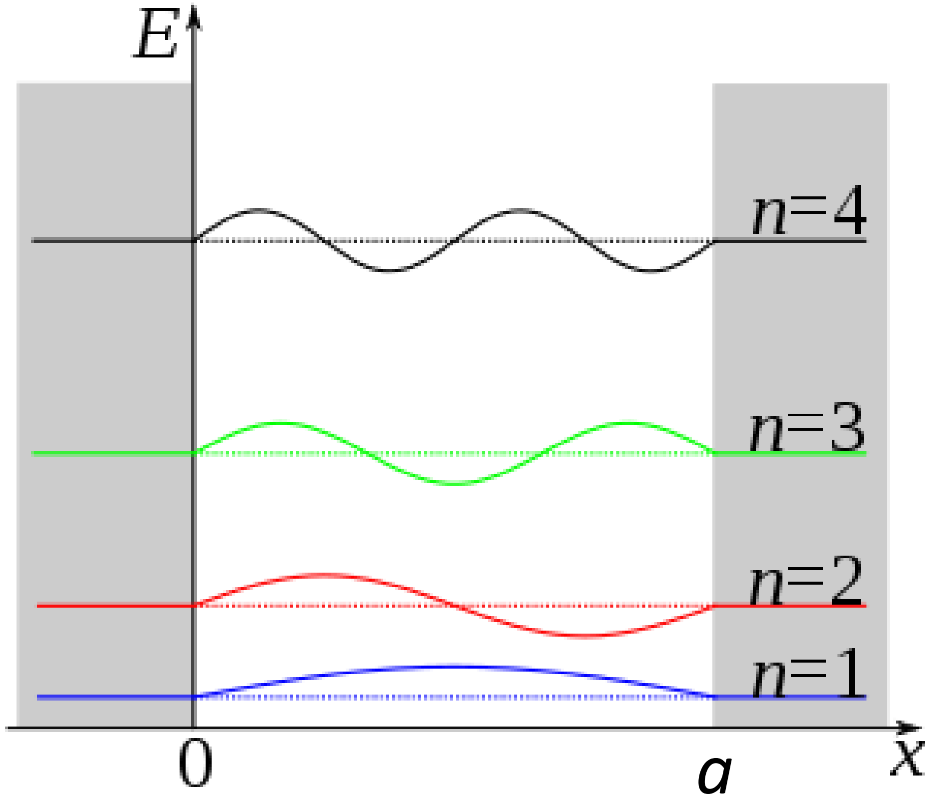
Energie částice závisí na:

- na hmotnosti částice
- na šířce jámy

$$\Psi(x) = A\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\cdot x\right) \xrightarrow[\text{Podmínka: } 1 = \langle\Psi|\Psi\rangle]{} A = \sqrt{\frac{2}{a}} \rightarrow \Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\cdot x\right)$$

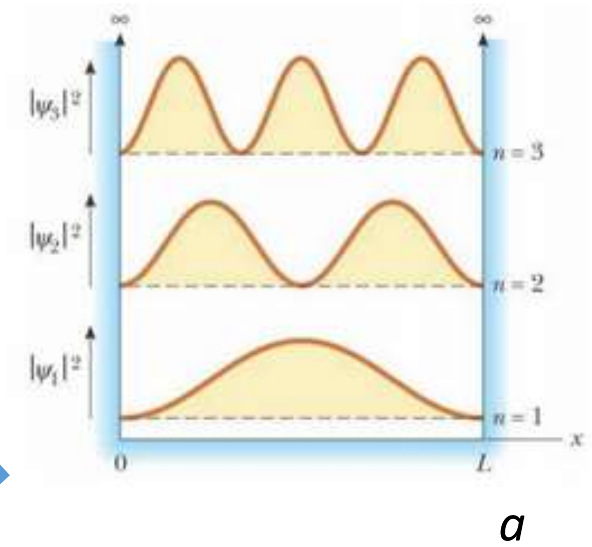
$$\boxed{\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}\cdot x\right)}$$

Vlnová funkce popisující různé stavy částice v pravoúhlé potenciální jámě
***n* – hlavní kvantové číslo**



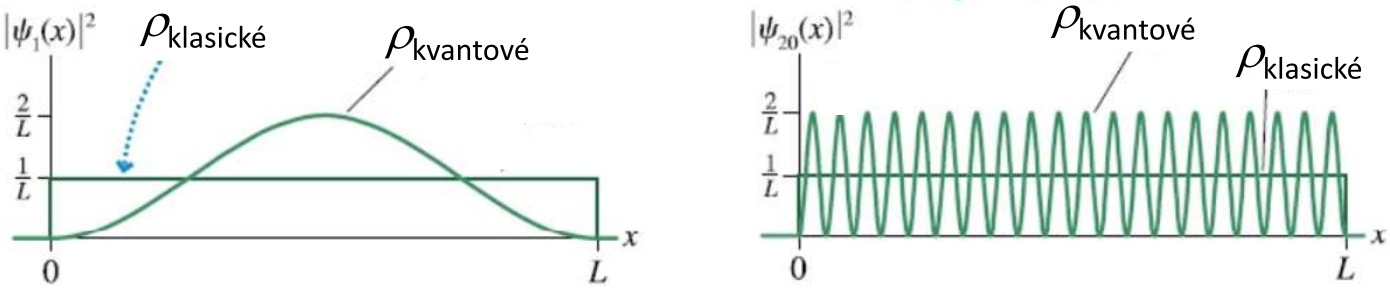
Hustota pravděpodobnosti výskytu částice v jámě:

$$\rho = \Psi^*(x)\Psi(x)$$



Až teprve pro velká kvantová čísla n, kdy se vlnová délka částice zkrátí významě oproti šířce jámy, se počne částice chovat více klasicky (tj. pravděpodobnost výskytu částice v kterémkoli bodě jámy je stejná):

L=a



Trojrozměrná pravoúhlá jáma: Zkuste odvodit tvar vlnové funkce částice v 3D prostoru a její energii

3. Částice v jednorozměrné parabolické jámě = harmonický oscilátor (nástin postupu)

$$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x)$$

$$\hat{V} = \frac{1}{2}kx^2$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\right)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right)h\nu \qquad n = 0,1,2....$$

n – vibrační kvantové číslo

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}$$ — frekvence kmitu

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} H_n\left(\alpha^{1/2}x\right)e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\alpha = \sqrt{km/\hbar^2}$$

$H_n(\alpha^{1/2}x)$ – **Hemitovy polynomy**

Příklady Hermitových polynomů:

$$H_0 = 1$$

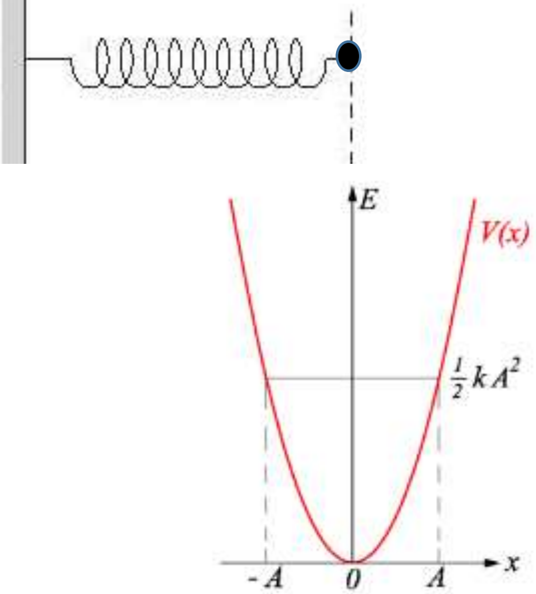
$$H_1 = 2\alpha^{1/2}x$$

$$H_2 = 4\left(\alpha^{1/2}x\right)^2 - 2$$

Vizualizace vlnových fcí (viz další strana)

Princip korespondence s klasickou fyzikou:

k – silová konstanta pružiny

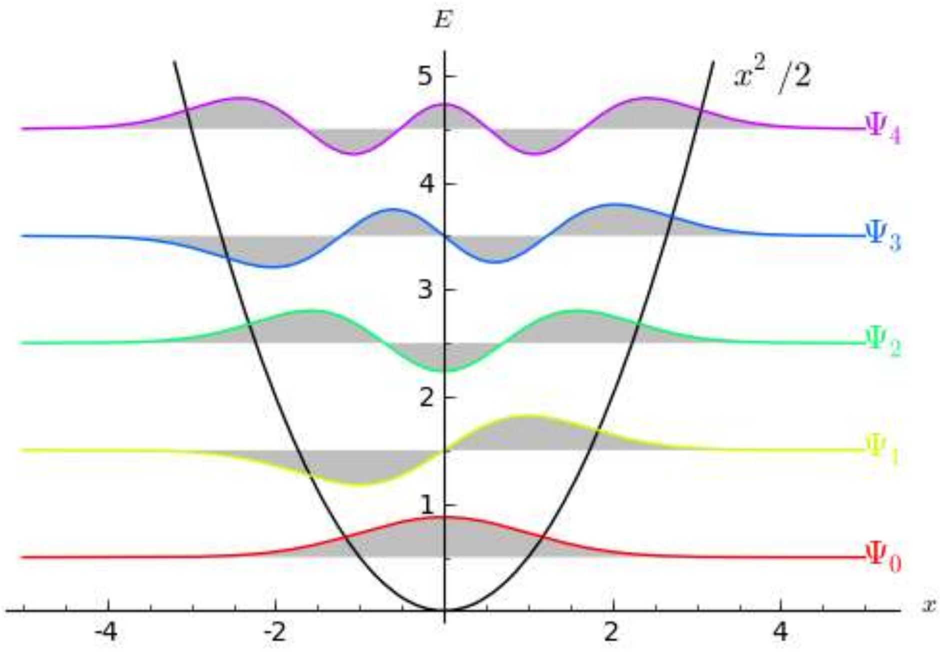


harmonický oscilátor je systém, který, je-li vychýlen ze své rovnovážné polohy, pocit´uje sílu F, úměrnou míře vychýlení, x : $\boldsymbol{F=-kx}$

Částice v nejnižším vibračním kvantovém stavu, tj. s n = 0 má vibrační energii: $E = \frac{1}{2} h\nu$ **tzv.:** energie nulového vibračního bodu

- **To znamená, že částice kmitá i v tom energeticky nejnižším vibračním stavu!** To je evidentně obrovský rozdíl od klasické fyzikální situace, kdy je možné částici zastavit ve svém kmitu

v souladu s Heisenbergovým principem neurčitosti !!



Kvantový harmonický oscilátor je základní model pro pochopení vibrační spektroskopie!