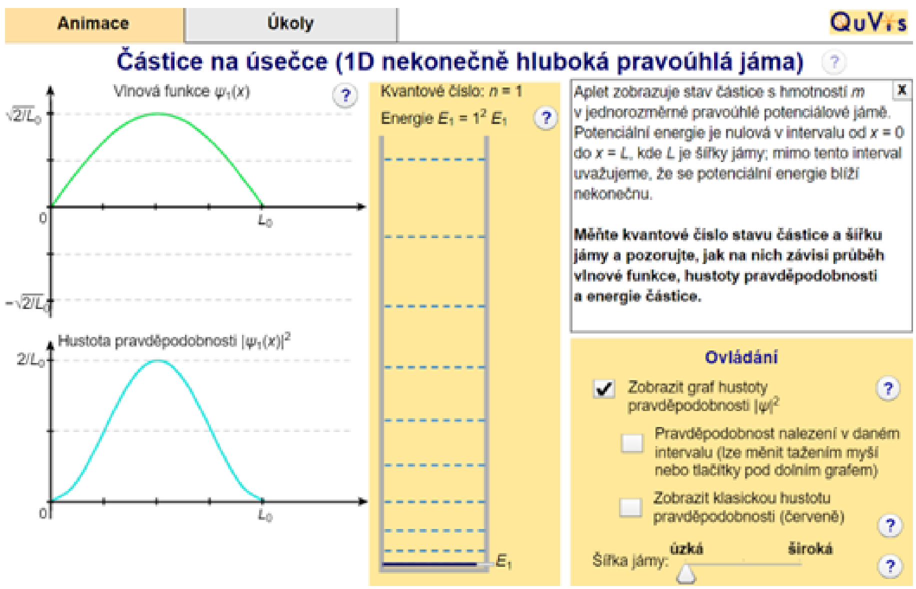
Nekonečná pravoúhlá potenciálová jáma

Zadání úloh

V tomto pracovním listu budete zkoumat nekonečnou pravoúhlou potenciálovou jámu. Připomeňte si, jak vypadají stacionární vlnové funkce popisující stav částice v této jámě, jak vypadají příslušné hustoty pravděpodobnosti a jaké jsou povolené energie částice. Použijte následující odkaz, který vás zavede na QuVis aplet zobrazující stacionární stavy v nekonečné potenciálové jámě:

http://fyzweb.cz/materialy/kvantovka/Infwell1d/infwell1d.html

Zobrazí se vám tento aplet:



Obrázek 1: Správně nastavený QuVis aplet.

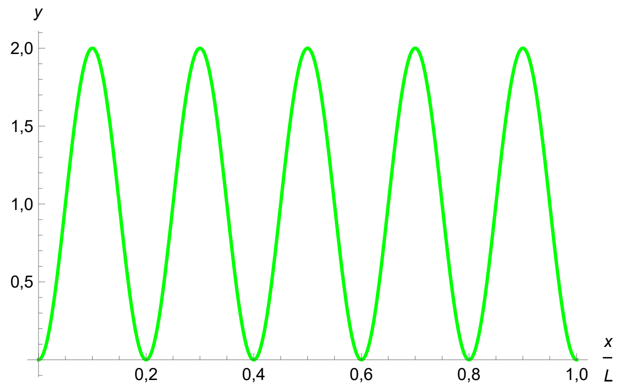
Vlevo nahoře vidíte graf vlnové funkce. Uprostřed vidíte schéma energetického spektra, kliknutím na konkrétní energetickou hladinu se vám zobrazí odpovídající vlnová funkce. Vlevo dole rovněž můžete pozorovat graf hustoty pravděpodobnosti. Zobrazí se vám po kliknutí na políčko v pravé části obrazovky.

1. Uvažujme graf na obrázku 2.

   - Jde o graf vlnové funkce, nebo hustoty pravděpodobnosti? Vysvětlete.
   - Vyjádřete energii částice nacházející se ve stavu, jemuž odpovídá tato vlnová funkce, resp. hustota pravděpodobnosti.

2. V této úloze se zaměřte na schéma uprostřed stránky. Zobrazuje energetické hladiny částice v jámě. Na svislé ose je hodnota energie, energie roste směrem nahoru.

   - Klikněte na energetickou hladinu odpovídající některému excitovanému stavu. Jak se změní hodnota energie, když měníte šířku jámy?



Obrázek 2: Zadání úlohy 1.

- Pozorujte a popište, jak se mění graf vlnové funkce a hustoty pravděpodobnosti konkrétního stacionárního stavu se změnou šířky jámy. Zaměřte se na počet lokálních extrémů a na hodnotu lokál. extrémů.

3. Zobrazte grafy hustoty pravděpodobnosti pro stavy s kvantovým číslem:

    - $n = 4$,
    - $n = 8$.

    Určete pro každý stav x-ové souřadnice míst v jámě, kde částici najdeme s nulovou pravděpodobností. Uvažujte přitom, že je rozměr jámy určen intervalem $[0; L]$.

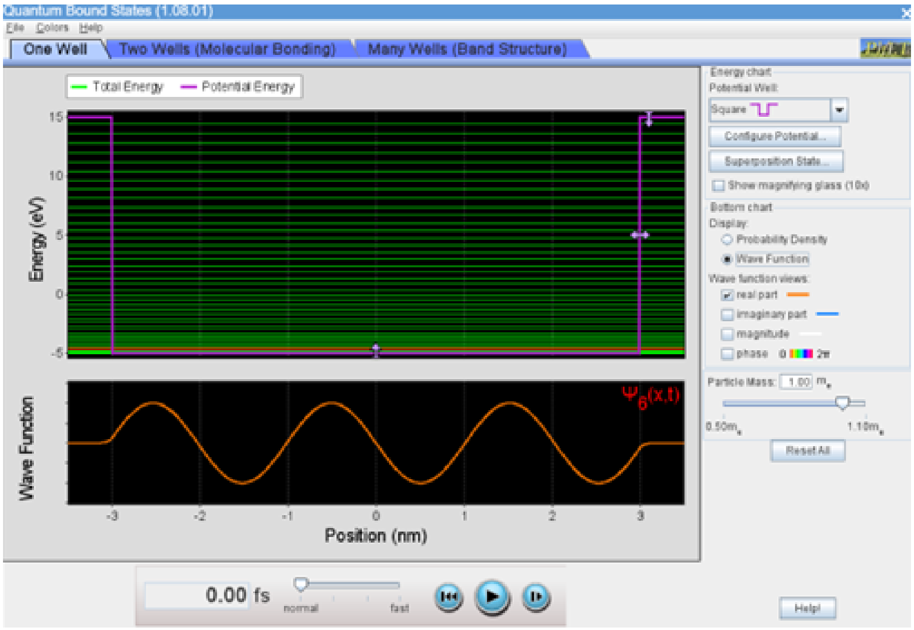
Pro řešení následujících úloh použijte odkaz, který vás zavede na stránku s aplety zobrazující jednoduché problémy kvantové mechaniky:

https://phet.colorado.edu/sims/cheerpj/bound-states/latest/bound-states.html?simulation=bound-states

Vpravo nahoře rozklikněte „Potential Well“ a vyberte možnost „Square“. Nastavte co nejhlubší a nejširší jámu. Na obrázku 3 je příklad správného nastavení.

Budete pracovat s tímto apletem, neboť umí zobrazit časový vývoj a určit hodnoty energie. Upozorněme předem, že zde nebudete pracovat s nekonečně hlubokou jámou, nýbrž s jámou velmi hlubokou.

4. Připomeňte si podobu časového členu v předpisu stacionární vlnové funkce příslušející kvantovému číslu n. Vyberte si dva stacionární stavy s velice rozdílnými energiemi. Postupně si nechte zobrazit grafy odpovídajících vlnových funkcí a zapněte jejich časový vývoj. Porovnejte periodu časového vývoje těchto grafů. Stručně popište, jak souvisí pořadí stavu s frekvencí vývoje vlnové funkce.



Obrázek 3: Správně nastavený PhET aplet.

5. Rozklikněte vpravo možnost „Configure Potential“. Nastavte šířku jámy na 4,7 nm, hloubku jámy na 20 eV a minimum potenciální energie na −5 eV (v apletu označeno jako „Offset“). Hmotnost částice ponechte na hodnotě odpovídající hmotnosti elektronu. Postupně klikněte na pět sousedních energetických hladin, konkrétně na hladiny příslušející stavům s kvantovými čísly 1 až 5. Poznamenejte si kvantové číslo a hodnotu energie, která se vám při kliknutí zobrazí. Poté určete rozdíly mezi sousedními hladinami. Co můžete na základě svých výpočtů říct o energetickém spektru jámy?

Řešení úloh z pracovního listu „Nekonečná pravoúhlá potenciálová jáma“

1. - Jde o graf hustoty pravděpodobnosti, neboť zobrazovaná funkce má několik lokálních maxim a minim s hodnotou nula; nabývá pouze nezáporných hodnot. Funkce má na svém definičním oboru globální maximum rovno hodnotě $\frac{2}{L}$. Toto číslo je druhou mocninou normovací konstanty vlnové funkce.
   - Nejprve určíme podle počtu lokálních maxim kvantové číslo příslušející dané hustotě pravděpodobnosti. Kvantové číslo je rovno počtu lokálních maxim hustoty pravděpodobnosti, kterých jsme napočítali pět. Vzorec pro výpočet energie částice o hmotnosti m nacházející se v jámě šířky L ve stavu popsaném kvantovým číslem n má tuto podobu:

     $$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = n^2E_1.$$

     Máme částici nacházející se ve stavu s $n = 5$, tedy ve čtvrtém excitovaném stavu. Energii částice lze pak vyjádřit ve tvaru:

     $$E_5 = \frac{5^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = 25 \cdot \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}.$$

2. - S rozšiřováním jámy energie libovolného stacionárního stavu klesá. Naše pozorování můžeme podpořit použitím vzorce pro energii částice nacházející se v n-tém stavu v jámě šířky L:

     $$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}.$$

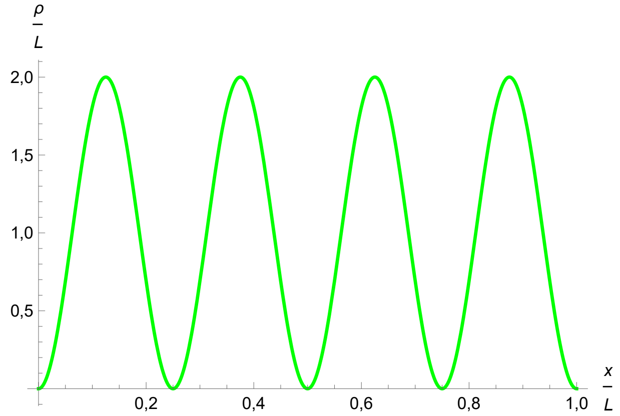
     Z tohoto vzorce je vidět, že energie klesá s druhou mocninou šířky jámy.
   - Když rozšiřujeme jámu, pozorujeme, že počet extrémů vlnové funkce i hustoty pravděpodobnosti se nemění. To, co se mění, je hodnota lokálních extrémů, která se s rozšiřováním jámy zmenšuje, aby výsledné funkce vyhovovaly normovací podmínce.

3. Zobrazíme si v apletu příslušný stacionární stav a z grafu hustoty pravděpodobnosti odečteme x-ové souřadnice míst, v nichž má hustota pravděpodobnosti nulovou hodnotu.

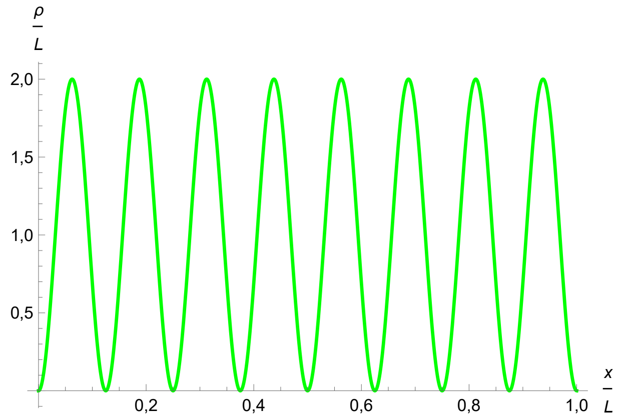
   - $n = 4$:

     Graf hustoty pravděpodobnosti lze rozdělit na čtyři shodné oblasti. Nulové body hustoty pravděpodobnosti tvoří hranice těchto oblastí. Souřadnice těchto míst budou: 0, $\frac{L}{4}$, $\frac{L}{2}$, $\frac{3L}{4}$, L, viz obrázek 4.
   - $n = 8$:

     Situace je analogická předchozímu příkladu; opět nastavíme sedmý excitovaný stav a příslušnou hustotu pravděpodobnosti a hledáme její nulové body. Graf je rozdělen na osm oblastí, nulové body tvoří hranice těchto oblastí. Souřadnice míst, kde částici nalezneme s nulovou pravděpodobností, jsou: 0, $\frac{L}{8}$, $\frac{L}{4}$, $\frac{3L}{8}$, $\frac{L}{2}$, $\frac{5L}{8}$, $\frac{3L}{4}$, $\frac{7L}{8}$, L, viz obrázek 5.



Obrázek 4: Graf hustoty pravděpodobnosti odpovídající stavu s kvantovým číslem 4.



Obrázek 5: Graf hustoty pravděpodobnosti odpovídající stavu s kvantovým číslem 8.

4. Časový člen plynoucí ze Schrödingerovy rovnice má podobu: $e^{\frac{E_n t}{i\hbar}} = e^{-i\omega_n t}$. Čím větší bude energie částice, tím větší bude úhlová frekvence ω_n a tím „rychleji" se bude měnit graf. Čím větší bude kvantové číslo uvažovaného stavu, tím menší bude perioda vývoje grafu ψ.

5. Nastavili jsme požadované parametry. Nyní zapišme příslušné energetické hladiny:

   - $E_1 = -4{,}98\,\mathrm{eV}$.
   - $E_2 = -4{,}93\,\mathrm{eV} \rightarrow E_2 - E_1 = 0{,}05\,\mathrm{eV}$.
   - $E_3 = -4{,}85\,\mathrm{eV} \rightarrow E_3 - E_2 = 0{,}08\,\mathrm{eV}$.
   - $E_4 = -4{,}74\,\mathrm{eV} \rightarrow E_4 - E_3 = 0{,}11\,\mathrm{eV}$.
   - $E_5 = -4{,}59\,\mathrm{eV} \rightarrow E_5 - E_4 = 0{,}15\,\mathrm{eV}$.

   Vidíme, že rozdíly mezi dvěma sousedními hladinami nejsou všechny stejné, energetické spektrum tedy není ekvidistantní. Zde jsme pracovali s velmi hlubokou, avšak ne nekonečnou jámou. U nekonečné jámy také platí, že energetické spektrum není ekvidistantní.

Stavy s nízkou hodnotou energie se u velmi hluboké, nýbrž ne nekonečné jámy podobají natolik stavům v nekonečné jámě, že můžeme naše výsledky brát jako ověření toho, že spektrum nekonečné potenciálové jámy není ekvidistantní.

Rozdíl mezi dvěma sousedními energetickými hladinami částice nacházející se v nekonečné jámě můžeme určit pomocí vzorce, který jsme již uvedli výše. Vypočítejme tedy rozdíl E_{n+1} a E_n:

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

Z výpočtu je patrné, že rozdíl mezi sousedními energetickými hladinami je lineární funkcí kvantového čísla.

Spočítáme rozdíly mezi hladinami podle tohoto vzorce, například rozdíl E_1 a E_2 určíme takto:
$E_2 - E_1 = \frac{\pi^2 \cdot (1{,}06 \cdot 10^{-34})^2 \cdot (2 \cdot 1 + 1)}{2 \cdot 9{,}1 \cdot 10^{-31} \cdot (4{,}7 \cdot 10^{-9})^2} \doteq 8{,}20 \cdot 10^{-21}$ J.
Za redukovanou Planckovu konstantu dosazujeme přibližnou hodnotu
$\hbar \doteq 1{,}06 \cdot 10^{-34}$ Js.

Převedeme jouly na elektronvolty pomocí převodního vztahu:
$1\,\mathrm{eV} = 1{,}6 \cdot 10^{-19}$ J.

$E_2 - E_1 \doteq 5{,}12 \cdot 10^{-2}$ eV.

Stejným způsobem určíme rozdíly mezi dalšími dvojicemi sousedních hladin:

$E_3 - E_2 \doteq 0{,}85 \cdot 10^{-1}$ eV.

$E_4 - E_3 \doteq 1{,}19 \cdot 10^{-1}$ eV.

$E_5 - E_4 \doteq 1{,}54 \cdot 10^{-1}$ eV.

Vidíme, že rozdíly energetických hladin vypočítané podle vzorce odvozeného pro nekonečnou jámu se poměrně dobře shodují s hodnotami, které jsme naměřili v apletu. Je namístě podotknout, že v apletu pracujeme se zaokrouhlenými hodnotami, nejistota se přenáší mezi rozdíly. Pokud jste již řešili úlohy na téma lineární harmonický oscilátor, porovnejte mezi sebou řešení této úlohy, která byla věnovaná energetickému spektru jámy.