



KATEDRA TEORETICKEJ FYZIKY A DIDAKTIKY FYZIKY
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY
UNIVERZITA KOMENSKÉHO, BRATISLAVA

PRAVOUHLÉ JAMY
V KVANTOVEJ MECHANIKE –
– ALTERNATÍVNY PRÍSTUP

(Bakalárska práca)
4.1.1 Fyzika

MICHAELA RIFLIKOVÁ

Vedúci: Doc. RNDr. Marián Fecko, PhD.

Bratislava, 2011

Kód práce: eb7f3481-f457-4e74-93df-cc496e62ca84

Čestne prehlasujem, že som túto bakalársku prácu vypracovala samostatne
s použitím uvedených zdrojov.

Bratislava, 30. 5. 2011

.....

Michaela Rifliková

Pod'akovanie

V prvom rade by som sa chcela poďakovať svojmu vedúcemu Doc. RNDr. Mariánovi Feckovi, PhD. zato, že vymyslel takúto peknú tému a zato, že mi bohatým priehrstím venoval predovšetkým svoj čas, trpezlivosť a konštruktívnu kritiku nevynímajúc, čím umožnil moju (dúfam úspešnú) evolúciu na bakalára – pisateľa.

Ďakujem aj svojej mame zato, že ma pravidelne kŕmila, nenútila príliš často upratovať, vyvinula snahu na to, aby si zapamätala nie zrovna krátky názov tejto práce a samozrejme za veľkú podporu v zhone finálnej fázy.

A nakoniec, ďakujem zo srdca mojej stredoškolskej pani profesorky Alene Foltinovej, za jej pútavé rozprávania o fyzike, bez ktorých by som sa určite neocitla na tejto fakulte.

Abstrakt

<i>Autor:</i>	Michaela Rifliková
<i>Názov práce:</i>	Pravouhlé jamy v kvantovej mechanike – – alternatívny prístup
<i>Škola:</i>	Univerzita Komenského v Bratislave
<i>Fakulta:</i>	Fakulta matematiky, fyziky a informatiky
<i>Katedra:</i>	Katedra teoretickej fyziky a didaktiky fyziky
<i>Vedúci práce:</i>	Doc. RNDr. Marián Fecko, PhD.
<i>Miesto:</i>	Bratislava
<i>Dátum:</i>	30. 5. 2011
<i>Počet strán:</i>	65
<i>Druh záverečnej práce:</i>	Bakalárska práca

Abstrakt: Práca sa zaoberá riešením úloh s pravouhlými jamami v kvantovej mechanike využitím fázového priestoru bezčasovej Schrödingerovej rovnice (na osi sa nanáša vlnová funkcia a jej derivácia podľa súradnice). Táto rovnica druhého rádu sa nahradí sústavou dvoch rovníc prvého rádu. Jej riešenia je prirodzené interpretovať dynamicky – ako pohyb fiktívneho bodu vo fázovom priestore. Kvantová mechanika dáva pre tento pohyb isté obmedzenia. Pomocou nich je možné kresliť príslušné trajektórie a následne aj vlnové funkcie, ktoré im zodpovedajú. Metóda poskytuje aj hodnoty energií príslušných viazaných stavov a dáva trochu iný pohľad na dôvod jej kvantovania. Práca obsahuje veľa obrázkov, ktoré vznikli výpočtami a kreslením v softvéri *Mathematica*.

Kľúčové slová: kvantová mechanika, jednorozmerná pravouhlá potenciálová jama, fázový priestor

Abstract

Author: Michaela Rifliková
Title: Rectangular potential wells in quantum mechanics –
– an alternative approach
University: Comenius University in Bratislava
Faculty: Faculty of Mathematics, Physics and Informatics
Department: Department of Theoretical Physics
and Didactics of Physics
Advisor: Doc. RNDr. Marián Fecko, PhD.
City: Bratislava
Date: 30. 5. 2011
Number of pages: 65
Type of thesis: Bachelor thesis

Abstract: Thesis deals with solving problems with rectangular potential wells in quantum mechanics, making use of the phase space of the time-independent Schrödinger's equation (along the axes, values of wave function and its derivative are displayed). This second-order equation is replaced with the system of two first-order equations. In this way, solutions of the former may be naturally interpreted dynamically – a motion of a fictitious particle may be associated with each solution. Quantum mechanics imposes some restrictions on this motion, which enable us to draw corresponding trajectories and to display wave functions, as well. Besides that, this method provides us with values of allowed energies of bound states in question. Also, it offers a slightly new perspective on subject of energy-quantization. There is ample amount of pictures included. All of them, together with any necessary computations were executed by software *Mathematica*.

Key words: quantum mechanics, one-dimensional rectangular potential well, phase space

Obsah

Predhovor	1
Úvod	3
1 Zaslvenie do problematiky	5
1.1 Schrödingerova rovnica	5
1.2 Tradičný pohľad na dva typy riešení	6
1.2.1 Konštanta $k > 0$	6
1.2.2 Konštanta $k < 0$	7
1.3 Nový pohľad – vektorové polia	8
1.3.1 Základy	8
1.3.2 Pole $V = v\partial_\psi - \psi\partial_v$	9
1.3.3 Pole $V = v\partial_\psi + \psi\partial_v$	10
Zhrnutie	12
2 Popis metódy na úlohe o jednej jame	13
2.1 Všeobecné základy	13
2.1.1 Vlastnosti vlnovej funkcie	13
2.1.2 Škálovanie osí	14
2.2 Čo spôsobí škálovanie osí pre jednu jamu	16
2.3 Viazané stavy bez počítania	18
2.3.1 Trajektórie	18
2.3.2 Vlnové funkcie alebo ako správne „čítať“ obrázky	21
2.4 Viazané stavy – konkrétne hodnoty	22
2.4.1 Cesty a vlnové funkcie	22
2.4.2 Výpočet energií	25
Zhrnutie	26
3 Zložitejšie potenciály	27
3.1 Nekonečná jama	27
3.1.1 Sklon asymptot	27
3.1.2 Viazané stavy	28
3.2 Dve jamy	30
3.2.1 Základná konfigurácia	30

3.2.2	Bariéra v strede	35
3.2.3	Bariéra vpravo	38
3.2.4	Iná hĺbka	40
3.3	Tri jamy	43
3.3.1	Základná konfigurácia	43
3.3.2	Dve symetrické vnútorné bariéry	49
	Zhrnutie	52
	Záver	53
	A Vektorové polia – všeobecný úvod	55
A.1	Čo je to vektorové pole?	55
A.2	Integrálne krivky	56
A.3	Tok	57
A.4	Príklad	57
	B Jedna jama učebnicovo	59
	C Mathematica	61
	Literatúra	65

Zoznam obrázkov

1.1	Tvary rotačného poľa pre hodnoty $k = 0.2, k = 1, k = 4$	10
1.2	Tvary hyperbolického poľa pre hodnoty $k = -0.2, k = -1, k = -4$	11
2.1	Jedna jama: Potenciál	16
2.2	Zavedenie uhla $\Phi(e)$	17
2.3	Sklon asymptot pre rôzne e	17
2.4	Závislosť $\Phi(e)$	17
2.5	Derivácia $\frac{d\Phi}{de}$	17
2.6	Hyperbolická rotácia	19
2.7	Rotácia	19
2.8	Trajektória častice pre e menšie, rovné a väčšie ako e_z	20
2.9	Ďalšie tri viazané stavy pre jednu jamu	20
2.10	Aplikácia <i>Jedna jama – viazané stavy</i>	23
2.11	Jedna jama: Cesta k základnému stavu	24
2.12	Jedna jama: Prvé štyri viazané stavy	24
2.13	Jedna jama: Grafické riešenie pre energie viazaných stavov	25
3.1	Nekonečná jama: Sklon asymptot pre rôzne hĺbky	28
3.2	Nekonečná jama: Prvé štyri viazané stavy	29
3.3	Dve jamy základ: Potenciál	30
3.4	Dve jamy základ: Cesta k základnému stavu	31
3.5	Dve jamy základ: Prvé štyri viazané stavy	32
3.6	Dve jamy základ: Porovnanie základného stavu pri vzdalovaní jám	32
3.7	Dve jamy základ: Prvé štyri viazané stavy pre jamy veľmi ďaleko od seba	34
3.8	Dve jamy základ: Striedanie rastúcej a klesajúcej závislosti pre $\mathcal{E}(v)$	34
3.9	Dve jamy bariéra stred: Potenciál	35
3.10	Dve jamy bariéra stred: Prvé štyri viazané stavy	36
3.11	Dve jamy bariéra stred: Porovnanie druhého excitovaného stavu pri zvyšovaní bariéry	37
3.12	Dve jamy bariéra vpravo: Potenciál	38
3.13	Dve jamy bariéra vpravo: Prvé štyri viazané stavy	39
3.14	Dve jamy bariéra vpravo: Porovnanie prvého excitovaného stavu pri zvyšovaní bariéry	39
3.15	Dve jamy inej hĺbky: Potenciál	40

3.16	Dve jamy iná hĺbka: Prvých šesť viazaných stavov	42
3.17	Tri jamy základ: Potenciál	43
3.18	Tri jamy základ: Cesta k základnému stavu	44
3.19	Tri jamy základ: Cesta k prvému excitovanému stavu	44
3.20	Tri jamy základ: Tretí až šiesty viazaný stav	45
3.21	Tri jamy základ: Porovnanie tretieho excitovaného stavu pri vzdáľovaní jám .	46
3.22	Tri jamy základ: Prvých šesť viazaných stavov pre jamy veľmi daleko od seba .	47
3.23	Tri jamy základ: Závislosť celkovej energie $\mathcal{E}(v)$	48
3.24	Tri jamy vnútorné bariéry: Potenciál	49
3.25	Tri jamy vnútorné bariéry: Prvé štyri viazané stavy	50
3.26	Tri jamy vnútorné bariéry: Porovnanie základného stavu pri zvyšovaní bariéry	51
3.27	Tri jamy vnútorné bariéry: Porovnanie základného stavu pri vzdáľovaní jám .	51
A.1	Vektorové pole $V = \partial_x \equiv 1 \cdot \partial_x + 0 \cdot \partial_y$	56
A.2	Konštrukcia vektora v bode (1,1)	58
A.3	Celé vektorové pole	58
B.1	Veľmi plytká a úzka jama	60
B.2	Široká a hlboká jama	60
C.1	Kód v <i>Mathematice</i> pre jednu jamu	63

Predhovor, alebo to snád' nemyslíte vážne, slečna Rifliková

Rodený dobrodruh – študent fyziky si na svojej ceste za poznaním prejde rôznymi štádiami. Keď sa v prvom a druhom ročníku zoznámi s fyzikou makrosveta a vnikne do tajov mechaniky a elektromagnetizmu, je mu dovolené vstúpiť aj do sveta celkom odlišného – kvantového. Pomaličky sa oboznamuje so zvláštnymi zákonitosťami, ktoré v ňom platia a snaží sa pospájať si ďalšie nitky „štrikovanice“¹.

Cesta je to, vraví sa, neľahká a trnistá, mnohí pútnici zblúdia, alebo z nej úplne zídu, súc pohltení bezodnou temnotou, v ktorej si na veky vekov môžu byť istí svojou polohou aj hybnosťou zároveň. . . . Avšak tí z udatných, ktorí sa nenechajú odradiť, môžu pri putovaní okrem vojnových zranení nadobudnúť aj skúsenosti a kvantovomechanický cit, ktorý k úprimnému počudovaniu nerastie na stromoch, ale získava sa v pote tváre práve riešením príkladov²! Tých je na prehryzenie ponúknutých neúrekom, pričom sa garantuje, že ani tým najväčším jedákom nikdy v bruchách od hladu nezaškrvří.

Jedným z úvodných problémov pre nádejných adeptov kvantovej mechaniky – kvantomechanikátorov³ je úloha o konečnej potenciálovej jame. Jej preriešenie dá začínajúcemu KVM pevný základ do budúca, na ktorom bude neochvejne stáť pri dumaní nad exotickjšími problémami – tzv. lomihlavmi. Samozrejme, že mierne odrastený, operátormi a vodíkom ošľahaný, chytľavý entuziazmus rozptyľujúci a žiadnymi poruchami netрпиaci KVM⁴ nad takou do neba volajúcou trivialitou len mávne ledabolo rukou. Ukazuje sa však, že úloha je hodná našej pozornosti, aj keď sme si okúsili už aj mierne tvrdšieho chlebička.

Ako iste vieme, štandardné učebnicové riešenie sa zakladá na tzv. metóde zošívania, čo nie je nič iné ako zabezpečenie spojitosti vlnovej funkcie a jej derivácie. Zošívacie podmienky potom povedú na rovnice pre energie viazaných stavov. Tie sú bohužiaľ transcendentné a tým pádom analyticky neriešiteľné. Graficky však energie získať môžeme, chvíľu sa teda pokocháme pohľadom na ladné krivky tangensov a potom šup – šup na niečo nové. Alebo nie?

¹Tí, čo vedia, vedia, tí čo nevedia, nech určite zájdu na prednášky Vlada Černého.

²Najlepšie snád' takých, ktoré *majú* riešenie.

³ďalej len KVM

⁴U tých, ktorí sa cítia byť na vrchole už po prvom semestri QM, pozorujeme prudko klesajúcu závislosť výšky hrebienka $v_h(t, T)$.

Naša jama je omnoho zaujímavejšia, ako by sa na prvý pohľad zdalo. Hlavne keď sa na ňu pozrieme z úplne nového uhla a omnoho intuitívnejším spôsobom. Namiesto zdĺhavého počítania si radšej nakreslíme zrozumiteľné obrázky a celé riešenie vyčítame z nich. Metódou, ktorá nám toto kreslenie umožňuje, pritom budeme vedieť robiť bez väčšej námahy predpovede aj pre zložitejšie problémy s viacerými jamami. Každý, kto má v živote vysoké ambície, určite nepohrdne možnosťou stať sa uznávaným odborníkom na pravouhlé potenciálové jamy⁵.

Pýtate sa: je toto vôbec možné? Nie sú to len prachsproste plané reči a trápna reklama? Odpoveď (na prvú⁶ otázku) je kladná. Dôkaz, že realita je naozaj realitou a nie Matrixom, práve držíte v rukách. Neobjavíme síce žiadne nové kontinenty, ale naše skúmanie bude aspoň tak poučné ako zábavné. A komu sa nechce čítať, vždy sú tu predsa obrázky. Je ich veľa a sú farebné! Kladiete vás už teraz od nudy na pelech? Tak skúste nájsť Batmana a dievča s vrkočmi, ktorí sa skryli medzi stránkami⁷;))

Ak vás téma zaujala, dúfame, že budete listovať aj ďalej. V tom prípade vás čaká úvodná Kapitola 1, v ktorej sa zoznámime sa problémom a možnými typmi jeho riešenia, Kapitola 2, v ktorej sa naučíme metódu kreslenia na príklade o jednej jame, záverečná Kapitola 3, v ktorej sa pozrieme na príklady o dvoch a troch jamách a zopár dodatkov.

Doskvantovania priatelia!

⁵Určite sa vám pred očami zmaterializovalo skvelé uplatnenie na trhu práce.

⁶Na druhú sa kvôli (aspoň) predstieranej úcte k autorke neodpovedá.

⁷Fantázii sa medze nekladú a preto je dosť možné, že nájdete aj kadečo iné. . .

Úvod

Jednorozmerná bezčasová Schrödingerova rovnica je rovnicou druhého rádu pre funkciu $\psi(x)$. Je zrejmé, že ju môžeme prepísať ako sústavu dvoch rovníc prvého rádu pre funkcie $\psi(x)$ a $\psi'(x) \equiv v(x)$. V priestore, kde na osi nanášame ψ a v , t.j. vo *fázovom priestore* Schrödingerovej rovnice, nám každé riešenie tejto rovnice vytvára *krivku* parametrizovanú premennou x . Toto môžeme chápať aj ako *časový vývoj* fiktívnej častice vo fázovom priestore (keď x vnímame ako čas) – krivku teda interpretujeme ako *trajektóriu* tohoto bodu.

Táto predstava je možná, ale z hľadiska praktického riešenia nám *všeobecne* nijako nepomáha – nájdenie spomínanej trajektórie nie je o nič ľahšie ako vyriešenie pôvodnej Schrödingerovej rovnice. V tejto práci sa snažíme ukázať, že pre špeciálny prípad – *pravouhlé potenciálové jamy* – môže byť pohľad cez fázový priestor užitočný. Pritom sa obmedzíme len na *viazané stavy*.

Tradičné riešenie tohoto problému spočíva v zošívaní dvoch typov riešení – sínusov a kosínusov vnútri jamy a exponent mimo jamy. Navyše, zo spomínaných exponent vyberáme vždy tú, ktorá zabezpečuje celkovú normovateľnosť výslednej vlnovej funkcie.

Ak sa na to isté pozrieme optikou nášho fázového priestoru, zo sínusov a kosínusov sa stanú *rotácie* v tomto priestore a z exponent *hyperbolické rotácie*. Vidíme teda, že ak x chápeme ako čas (ktorý beží od $-\infty$ po ∞), celá trajektória vznikne zlepením kúskov, ktoré môžu byť len dvoch spomínaných typov.

Bežná požiadavka na *spojitosť* ψ a ψ' vedie vo fázovom priestore na požiadavku spojitosti trajektórie. Druhá dôležitá podmienka, ktorú požaduje kvantová mechanika – *normovateľnosť* vlnovej funkcie – sa vo fázovom priestore prejaví tak, že trajektória sa začína aj končí v počiatku, teda v bode $(\psi, v) = (0, 0)$.

Ukazuje sa, že tento postup naozaj funguje. Umožňuje naozaj prakticky nachádzať spomínané trajektórie spolu s energiami viazaných stavov a k nim prislúchajúce vlnové funkcie. Výhodou tejto novej metódy je, že viazané stavy nachádzame priamejšie a riešenia pre nás nie sú len priesečníkmi na grafe. Máme možnosť priamo vidieť vývoj od jedného viazaného stavu k druhému.

Aj keď pre konkrétny výpočet a vytvorenie grafických aplikácií v programe *Mathematica* bol použitý počítač, sila našej metódy spočíva aj v tom, že v prípade záujmu (len) o kvalitatívnu stránku riešenia si ho človek (v jednoduchších prípadoch) odvodí takpovediac „na kolene“ a žiadne výpočty, či počítač nepotrebuje. Samotný princíp je jednoduchý a jediným potrebným vybavením je papier a ceruzka. Zložitejšie prípady si už počítač vyžadujú,

zdôrazňujeme ale, že jeho práca nespočíva v naozajstnom numerickom riešení diferenciálnych rovníc. Spočíva v tom, že počítač za nás rýchlo zlepší príslušné kúsky trajektórie, zobrazí výsledok a my sa pohľadom na obrazovku presvedčíme, či zobrazená trajektória spĺňa vyššie spomínané požiadavky.

V prvej kapitole sa teda prehryzieme úvodnou teóriou, kde sa čosi naučíme aj o *vektorových poliach* a ich *tokoch*. Tie nie sú esenciálnou súčasťou práce, ale zjednodušujú a vysvetľujú už spomínaný tvar trajektórií vo fázovom priestore.

V druhej kapitole prejdeme cez všetky potrebné nástroje, ktoré využijeme na zostavovanie obrázkov vo fázovom priestore. Prácu nám podstatne uľahčí škálovanie osí v tomto priestore. Na učenie nám posluží najjednoduchší problém – *jedna konečná jama*.

V tretej kapitole sa pozrieme na tvary trajektórií a vlnových funkcií pre viazané stavy konkrétnych konfigurácií potenciálu. V krátkosti sa zmienime o *nekonečnej jame* a prejdeme k zložitejším *dvom jamám*. Tam sa nám už naskytujú rôzne možnosti. Preskúmame, čo sa bude diať, keď budeme meniť vzájomnú vzdialenosť medzi jamami, prípadne meniť ich hĺbku, či výšku potenciálu v ich okolí a vytvárať bariéry. Na záver sa pozrieme aj na dva príklady s *troma jamami*.

Pre prípadných záujemcov sú pripravené dodatky, v ktorých buď obnovíme veci známe (štandardné riešenie pre jednu jamu na porovnanie) alebo dáme úvod k nejakým novým (vektorové polia). Opíšeme si aj základné atribúty tzv. notebookov v Mathematice a iné zaujímavosti a problémy, s ktorými sme sa pri práci s ňou stretli.

POZNÁMKA:

Aby sme sa vyhli možným nedorozumeniam, uveďme význam nasledujúcich (slovných) označení

- **potenciál** sa používa namiesto zdĺhavého pomenovania „potenciálna energia“
- **trajektória**/obrázok (vo fázovom priestore) sú ekvivalentné
- **častica** je takmer vždy fiktívna častica, ak by šlo o reálnu, uvedieme to
- **energie** a **dĺžky** neskôr budú bezrozmerné energie a dĺžky
- τ bude **priestorová premenná**; pre fázový priestor ju však budeme chápať ako **čas**

Teraz je už snáď všetko svedomito pripravené a môžeme sa smelo pustiť do bádania.

Kapitola 1

Zasvätenie do problematiky

V tejto kapitole sa zoznámime s problémom, ktorý budeme v práci riešiť a opíšeme jeden (z viacerých možných) spôsobov náhľadu naň. Problémom je hľadanie energií a vlnových funkcií viazaných stavov pre kvantovomechanické úlohy dosť špeciálneho typu, a to *jednorozmerné pravouhlé jamy*. Náhľad spočíva v tom, že sa zavedie *fázový priestor* Schrödingerovej rovnice a predstava *pohybu fiktívneho bodu* v tomto priestore. Okrem tradičného prístupu sa zavedie tiež jazyk *vektorových polí* a ich *tokov*.

1.1 Schrödingerova rovnica

Budeme sa zaoberať riešeniami *jednorozmernej bezčasovej* Schrödingerovej rovnice, čiže diferenciálnej rovnice

$$\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (1.1)$$

Rovnicu (1.1) si najprv zjednodušíme prechodom k bezrozmerným veličinám. Porovnaním prvého člena vľavo a člena vpravo vidíme, že ak zavedieme (zatiaľ) ľubovoľnú dĺžkovú škálu L_0 , tak výraz

$$E_0 \equiv \frac{\hbar^2}{2mL_0^2} \quad (1.2)$$

má rozmer energie (dve čiarky na ψ urobia rozmerovo to isté ako násobenie výrazom $\frac{1}{L_0^2}$). Táto energia, ktorá závisí od konkrétneho výberu L_0 , sa dá použiť ako škála pre energie. Ďalej teda môžeme zaviesť bezrozmerné veličiny

$$\tau := \frac{x}{L_0} \quad \mathcal{E} := \frac{E}{E_0} \quad u := \frac{U(L_0\tau)}{E_0}, \quad (1.3)$$

ktorými sú postupne bezrozmerná dĺžka, celková a potenciálna energia. Keďže $\frac{d}{d\tau} = \frac{1}{L_0} \frac{d}{dx}$, tak (1.1) nadobudne (už bezrozmerný) tvar

$$\ddot{\psi} = -(\mathcal{E} - u(\tau))\psi, \quad (1.4)$$

kde bodka označuje deriváciu podľa τ .

Ak napokon označíme rozdiel energií ako $\mathcal{E} - u(\tau) =: k(\tau)$, tak dostaneme

$$\ddot{\psi} = -k(\tau)\psi. \quad (1.5)$$

Teraz zavedieme novú premennú $v := \dot{\psi}$. Z rovnice *druhého* rádu (1.5) sa stane sústava *dvoch* rovníc *prvého* rádu

$$\dot{\psi} = v \quad (1.6)$$

$$\dot{v} = -k(\tau)\psi. \quad (1.7)$$

Priestor, na osi ktorého nanášame veličiny ψ a v , sa volá *fázový priestor* rovnice (1.5). Každé riešenie sústavy (1.6) a (1.7), čiže každé riešenie *Schrödingerovej rovnice* (1.5), môžeme vnímať ako *pohyb fiktívneho bodu* v tomto fázovom priestore. Táto predstava je pre celú prácu rozhodujúca!

Sústava rovníc (1.6) a (1.7) vo fázovom priestore nie je o nič jednoduchšia ako pôvodná rovnica. Komplikácia v nej spočíva v závislosti k od (τ) . Nájst trajektóriu fiktívneho bodu je teda všeobecne ťažká úloha. Dá sa aj napriek tomu z tejto predstavy o pohybe bodu vo fázovom priestore niečo vyťažiť? Ukazuje sa, že áno, ak sa obmedzíme na dosť špeciálne, ale pre kvantovú mechaniku ešte stále zaujímavé potenciálne energie. A tými sú práve *pravouhlé jamy*. Prečo? Potenciál $u(\tau)$ pre pravouhlé jamy je funkcia, ktorá je po častiach *konštantná*. Čo znamená, že taká je aj funkcia $k(\tau)$ v rovnici (1.5).

Ak teda pochopíme pohyb fiktívneho bodu pre ľubovoľné konštanté k , tak budeme vedieť z takýchto pohybov poskladať celkovú trajektóriu tohoto bodu zodpovedajúcu úlohe o pravouhlej jame. Poďme sa teda pozrieť na konkrétne riešenia zodpovedajúce konštantnému k . Zistíme, že je kľúčové, či je táto konštanta kladná alebo záporná. Dostaneme tak totiž dve podstatne odlišné triedy trajektórií.

1.2 Tradičný pohľad na dva typy riešení

Sústava rovníc (1.6) a (1.7) pre konštanté k je veľmi jednoduchá a jej riešenie vieme napísať hneď. Toto riešenie závisí podstatne od toho, či je k kladné alebo záporné.

1.2.1 Konštanta $k > 0$

Ak $k = |k|$, čo fyzikálne znamená, že celková energia je väčšia ako potenciálna (sme v *klasicky dostupnej* oblasti, v budúcnosti *vnútro* jamy), dostávame sústavu rovníc

$$\dot{\psi} = v \quad (1.8)$$

$$\dot{v} = -|k|\psi. \quad (1.9)$$

Ak počiatočné podmienky označíme ako $\psi(0) \equiv \psi_0$ a $v(0) \equiv v_0$, riešenie môžeme napísať v maticovom tvare

$$\begin{pmatrix} \psi(\tau) \\ v(\tau) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\sqrt{|k|}\tau) & \sin(\sqrt{|k|}\tau) \\ -\sqrt{|k|}\sin(\sqrt{|k|}\tau) & \sqrt{|k|}\cos(\sqrt{|k|}\tau) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ v_0 \end{pmatrix}. \quad (1.10)$$

Všimnime si, že v najjednoduchšom možnom prípade, keď $|k| = 1$ bude naše riešenie (1.10) vyjadrené pomocou starej známej – matice *rotácie*¹. Náš fiktívny bod sa teda rovnomerne točí okolo stredu jednotkovou uhlovou rýchlosťou.

Vidíme, že pre iné hodnoty k už trajektóriami nebudú kružnice (matica vtedy nie je rotačná). Ľahko sa však dá presvedčiť, že ak rovnice (1.6) a (1.7) prepíšeme pre vhodné konštantné *násobky* pôvodných premenných (t.j. ak vhodne *preškálujeme* osi), v nových premenných dostaneme opäť rotácie a kružnice. (Z toho vyplýva, že pôvodne to boli elipsy. :) Neskôr – v ďalšej časti (1.3) o vektorových poliach efekty tohoto škálovania uvidíme názorne na obrázkoch. Ešte ďalej, v Kapitole 2 v časti (2.2) sa ukáže, že pre nás bude výhodné tvar kružníc zachovať a toto škálovanie nám príde vhod.

Dozvedeli sme sa teda, že v oblastiach, v ktorých bude $\mathcal{E} > u$ (vnútro jamy) nám fiktívna častica bude vo fázovom priestore za určitých podmienok obiehať rovnomerne po kružniciach.

Teraz trochu odbočíme. Rovinu (ψ, v) nazývame *fázovým priestorom*. Budú mať trajektórie (=kružnice) niečo spoločné s *fázovými portrétmi*, s ktorými sme sa stretli na teoretickej mechanike? Áno, budú. Rovnice (1.6) a (1.7) sú totiž Hamiltonove rovnice

$$\dot{\psi} = \frac{\partial H}{\partial v} \quad (1.11)$$

$$\dot{v} = -\frac{\partial H}{\partial \psi} \quad (1.12)$$

pre hamiltonián

$$H(\psi, v, \tau) = \frac{1}{2}(v^2 + k(\tau)\psi^2). \quad (1.13)$$

Na TM sme sa naučili, že krivky vo fázovom priestore, ktoré tvoria fázový portrét sú dané podmienkou $H = \text{konšt}$, a teda spájajú body s rovnakou energiou. Užitočné sú však len pre hamiltoniány, ktoré nezávisia od času. Náš hamiltonián (1.13) *nebude* závisieť od času (= τ), ak skúmaný potenciál (u) nebude závisieť od τ (čiže pôvodné U od x). Potenciál teda môže byť nanajvýš po častiach konštantný. A to je presne potenciál pravouhlých jám. Ak teda tu nakreslíme krivky podľa pravidla $H = \text{konšt}$, dostaneme v tomto prípade (pozri (1.13)) elipsy a pre $k = 1$ kružnice.

1.2.2 Konštanta $k < 0$

Pre zápornú konštantu $k = -|k|$ získavame nasledovnú sústavu rovníc

$$\dot{\psi} = v \quad (1.14)$$

$$\dot{v} = |k|\psi. \quad (1.15)$$

Potom riešenie v (klasicky zakázanej) oblasti s potenciálnou energiou väčšou ako celkovou, je možné v maticovom tvare napísať ako

$$\begin{pmatrix} \psi(\tau) \\ v(\tau) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh(\sqrt{|k|}\tau) & \sinh(\sqrt{|k|}\tau) \\ \sqrt{|k|}\sinh(\sqrt{|k|}\tau) & \sqrt{|k|}\cosh(\sqrt{|k|}\tau) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_0 \\ v_0 \end{pmatrix}. \quad (1.16)$$

¹Keď je mínusko takto, jedná sa o rotáciu v smere hodinových ručičiek.

Riešenie je teda pre $k = -1$ vyjadrené cez maticu *hyperbolickéj* rotácie. Trajektórie budú hyperbolami a špeciálne pre $k = -1$ to sú hyperboly s asymptotami, ktoré sú na seba kolmé. (Ak má čitateľ problém predstaviť si hyperbolickú rotáciu, môže si ju pozrieť na Obr. 1.2 a porovnať s obyčajnou rotáciou na Obr. 1.1.)

Opäť drobná odbočka. Tieto hyperboly by sme mohli dostať aj kreslením fázového portréту pre hamiltonián

$$H(\psi, v) = \frac{1}{2}(v^2 - k\psi^2). \quad (1.17)$$

O tom, ako sa tvary (oboch) trajektórií dajú vidieť rýchlejšie pre ľubovoľné hodnoty k , sa môžeme dočítať v nasledujúcej časti.

1.3 Nový pohľad – vektorové polia

Celá táto časť čerpá z literatúry [3] a [5]. Pre hlbšie porozumenie sa určite odporúča prečítať si Kapitulu 2: *Vektorové a tenzorové polia* v [3]. Úplne však postačí aj letmé nahliadnutie do Dodatku A.

1.3.1 Základy

Porovnajme „Schrödingerovu rovnicu“ v tvare (1.6) a (1.7) pre konštantné k

$$\begin{aligned} \dot{\psi} &= v \\ \dot{v} &= -k\psi. \end{aligned}$$

s rovnicami (A.3) a (A.4) pre integrálne krivky vektorového poľa z Dodatku A

$$\begin{aligned} \dot{x} &= V^x(x, y) \\ \dot{y} &= V^y(x, y). \end{aligned}$$

Vidíme, že rovnice (1.6) a (1.7) sú vlastne rovnicami pre integrálne krivky vektorového poľa

$$V = v\partial_\psi - k\psi\partial_v. \quad (1.18)$$

Ak $\psi(\tau)$ je riešenie Schrödingerovej rovnice (1.5), tak potom $(\psi(\tau), v(\tau) \equiv \dot{\psi}(\tau))$ je integrálna krivka poľa V . *Ale aj naopak!!!* Každé riešenie Schrödingerovej rovnice sa dá získať z integrálnej krivky vektorového poľa V . Teda poznať všetky integrálne krivky vektorového poľa V znamená poznať všetky riešenia Schrödingerovej rovnice.

Podľa toho, čo sme sa naučili v Dodatku A, vektorovému poľu V v rovine (x, y) prislúcha *tok* v tejto rovine. Ale aj naopak, pomocou tohoto toku vieme spätne nájsť (všetky) integrálne krivky.²

Čo z toho vyplýva pre nás? Naše pole (1.18) je definované vo fázovom priestore (ψ, v) . To znamená, že ak spoznáme jeho tok, spoznáme tým aj všetky jeho integrálne krivky, a teda

²Stačí aplikovať tok na ľubovoľný bod.

aj všetky riešenia Schrödingerovej rovnice. Poďme sa pozrieť ako konkrétne tok nášho poľa V vyzerá. Ukáže sa, že v hre budú vlastne dve vektorové polia, jedno pre kladné, jedno pre záporné k , t.j., že pole (1.18) sa správa *výrazne* inak pre kladné a záporné k .

Preskúmame teraz konkrétne dve polia, pre ktoré $k = 1$ a $k = -1$. Presvedčíme sa, že ich toky sú *rotácia* a *hyperbolická rotácia* roviny, pričom tieto dva prípady presne zodpovedajú riešeniam v podčastiach (1.2.1) a (1.2.2). Potom sa pozrieme aj na iné hodnoty k .

1.3.2 Pole $V = v\partial_\psi - \psi\partial_v$

Na základe rovníc (A.3) a (A.4) získame pre integrálne krivky tohoto poľa sústavu DR

$$\dot{\psi} = v \quad (1.19)$$

$$\dot{v} = -\psi. \quad (1.20)$$

A to sú úplne tie isté rovnice ako (1.8) a (1.9) pre $k = 1$. Vieme teda, že aj riešenie bude totožné.

Pomocou riešenia (1.10) môžeme tok poľa V zapísať v štandardnom tvare

$$\Phi_\tau : (\psi, v) \mapsto (\psi \cos \tau + v \sin \tau, -\psi \sin \tau + v \cos \tau) \quad (1.21)$$

Pre zaujímavosť a podporu tvrdenia (ktoré je v Dodatku A), že vektorové polia zodpovedajú *diferenciálnym operátorom prvého rádu*, si ukážme ako by sa tento problém riešil pomocou prepisu do polárnych súradníc.

Keďže prepočet parciálnej derivácie podľa φ dáva

$$\partial_\varphi = \frac{\partial x}{\partial \varphi} \partial_x + \frac{\partial y}{\partial \varphi} \partial_y = -r \sin \varphi \cdot \partial_x + r \cos \varphi \cdot \partial_y = -y \partial_x + x \partial_y = -V,$$

tak vidíme, že pole V môžeme zapísať v polárnych súradniciach ako

$$V = -\partial_\varphi \equiv 0 \cdot \partial_r + (-1) \cdot \partial_\varphi \equiv V^r(r, \varphi) \cdot \partial_r + V^\varphi(r, \varphi) \cdot \partial_\varphi. \quad (1.22)$$

V polárnych súradniciach teda rovnice pre integrálne krivky vyzerajú takto

$$\dot{r} = 0$$

$$\dot{\varphi} = -1$$

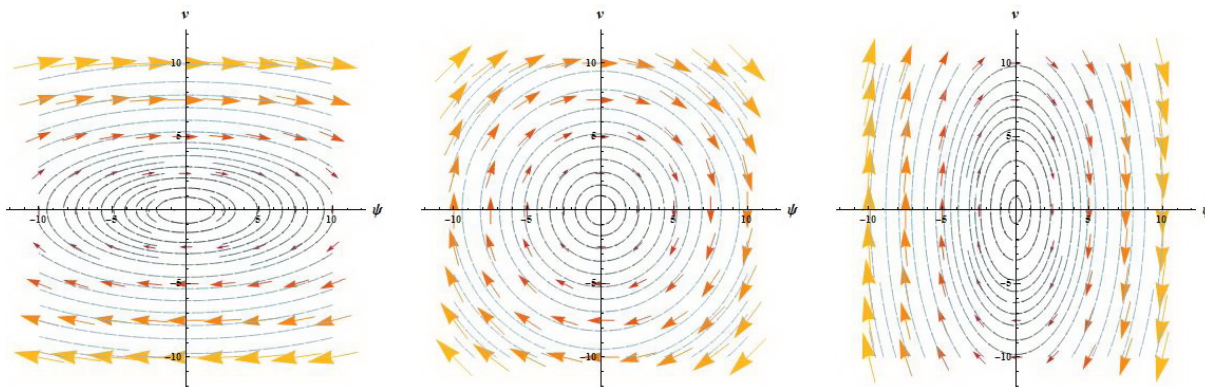
a ich riešenia

$$r(\tau) = r_0$$

$$\varphi(\tau) = -\tau + \varphi_0.$$

Tieto riešenia ukazujú, že tok generovaný poľom V vyzerá

$$\Phi_\tau : (r, \varphi) \mapsto (r, \varphi - \tau) \quad (1.23)$$

Obr. 1.1: Tvary rotačného poľa pre hodnoty $k = 0.2$, $k = 1$, $k = 4$

Ak chceme získať vyjadrenia integrálnych kriviek v kartézskych súradniciach, dosadíme riešenie do transformačných vzťahov a použijeme súčtové vzorce

$$\psi(\tau) = r_0 \cos(\varphi_0 - \tau) = \psi_0 \cos \tau + v_0 \sin \tau \quad (1.24)$$

$$v(\tau) = r_0 \sin(\varphi_0 - \tau) = -\psi_0 \sin \tau + v_0 \cos \tau \quad (1.25)$$

Výsledok v tvare matice (pre $k = 1$) by teda bol totožný s výsledkom (1.10) v podčasti (1.2.1).

A čo sa stane, keď $k \neq 1$? Nechajme si v programe *Mathematica* nakresliť vektorové pole a jeho integrálne krivky pre hodnoty $k = 0.2$, $k = 1$ a $k = 4$. Výsledky môžeme vidieť na Obr. 1.1.

Vidíme z nich, že z kružnice (pre $k = 1$) sa stávajú *elipsy* (pre zvyšné dve hodnoty k). Tieto elipsy sú rozťahnuté buď v smere osi ψ alebo v smere osi v , podľa toho, či k je menšie alebo väčšie ako 1. Na Obr. 1.1 to síce vidíme len pre špeciálne hodnoty k , ale toto tvrdenie platí (pre kladné k) všeobecne:

$$k \in \begin{cases} k < 1 & \text{elipsa pretiahnutá v } \psi\text{-tom smere,} \\ = 1 & \text{kružnica} \\ k > 1 & \text{elipsa pretiahnutá vo } v\text{-tom smere.} \end{cases} \quad (1.26)$$

Ak sa čitateľovi toto tvrdenie zdá nedôveryhodné, môže sa o jeho platnosti presvedčiť v podčasti (2.1.2) o škálovaní, alebo nahliadnuť do Dodatku A.

1.3.3 Pole $V = v\partial_\psi + \psi\partial_v$

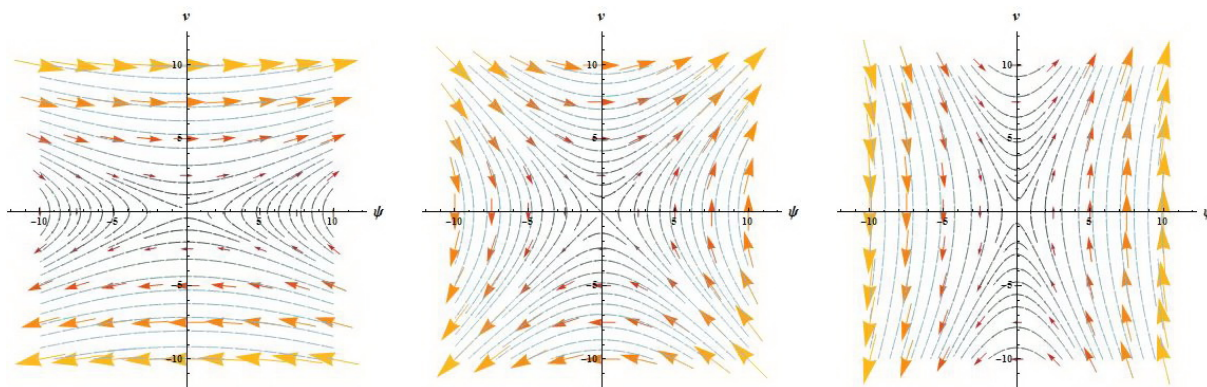
Na základe rovníc (A.3) a (A.4) získame pre integrálne krivky tohoto poľa sústavu DR

$$\dot{\psi} = v \quad (1.27)$$

$$\dot{v} = \psi. \quad (1.28)$$

A to sú úplne tie isté rovnice ako (1.14) a (1.15) pre $k = -1$. Aj riešenia teda budú totožné. Opäť môžeme zapísať príslušný tok v štandardnom tvare

$$\Phi_\tau : (\psi, v) \mapsto (\psi \cosh \tau + v \sinh \tau, \psi \sinh \tau + v \cosh \tau). \quad (1.29)$$

Obr. 1.2: Tvary hyperbolického poľa pre hodnoty $k = -0.2$, $k = -1$, $k = -4$

Ak chceme spraviť analogický prepočet ako v predošlej podčasti, musíme použiť „hyperbolické súradnice“ $(x, y) = r(\cosh \varphi, \sinh \varphi)$ ³. Upozorňujeme, že φ teraz nemá význam uhla, je to len parameter, ktorý prebieha od $(-\infty, \infty)$.

Rovnice pre integrálne krivky potom dostaneme ako

$$\begin{aligned} \dot{r} &= 0 \\ \dot{\varphi} &= 1. \end{aligned}$$

Ich riešenia budú

$$\begin{aligned} r(t) &= r_0 \\ \varphi(t) &= \tau + \varphi_0. \end{aligned}$$

Tieto riešenia nám dávajú tok poľa V

$$\Phi_\tau : (r, \varphi) \mapsto (r, \varphi + \tau), \quad (1.30)$$

Z riešení v súradniciach r, φ môžeme ľahko získať riešenia v kartézskych súradniciach

$$\psi(\tau) = r_0 \cosh(\varphi_0 + \tau) = \psi_0 \cosh \tau + v_0 \sinh \tau \quad (1.31)$$

$$v(\tau) = r_0 \sinh(\varphi_0 + \tau) = \psi_0 \sinh \tau + v_0 \cosh \tau \quad (1.32)$$

čo je samozrejme (pre $k = -1$) zhoda s riešením (1.16) v podčasti (1.2.2).

Znova sa môžeme pýtať, ako budú polia vyzerieť, keď budeme meniť konštantu k . Výsledky sú znova analogické a môžeme ich vidieť na Obr. 1.2. Hyperboly budú teraz roztiahnuté buď v smere osi ψ alebo v smere osi v , podľa toho, či (záporné) k je väčšie alebo menšie ako -1 .

³Veľmi pozorný čitateľ by mohol namietat, že takto zavedené súradnice nám nepokrývajú celú rovinu, ale iba jej štvrtinu. Drobnými modifikáciami uvedeného vzorca sa však dajú pokryť aj zvyšné tri štvrtiny roviny. Nakoniec sa totiž ukáže, že všetky tieto prípady sú zahrnuté v jednom vzorci v kartézskych súradniciach.

ZHRNUTIE Kapitoly 1

V tejto kapitole sme najprv uviedli bezčasovú jednorozmernú Schrödingerovu rovnicu, ktorú sme pre zjednodušenie previedli na bezrozmernú. Ďalej sme si ju prepísali na dvojicu rovníc prvého rádu. Tým pádom sú naše riešenia krivkami vo fázovom priestore a môžeme ich interpretovať ako trajektórie fiktívnej častice v ňom.

Zistili sme, že pri obmedzení sa na po častiach konštanté potenciály (pravouhlé jamy), budeme mať do činenia s (len) dvomi rôznymi typmi pohybov: rotačným a hyperbolickým. Pre vyskladanie celej trajektórie častice ich bude nutné skombinovať, pričom vnútru jám bude zodpovedať rotačný a vonkajšku hyperbolický pohyb.

Okrem tradičného pohľadu na riešenia sme si osvojili aj prístup cez vektorové polia a ich toky. Ten nám umožnil názorne pochopiť tvar oboch spomínaných druhov trajektórií.

Tento náhľad využijeme v nasledujúcej kapitole, pri explicitnej konštrukcii trajektórií pri probléme o jednej jame.

Kapitola 2

Popis metódy na úlohe o jednej jame

V tejto kapitole si najprv spomenieme na dve *všeobecné pravidlá z kvantovej mechaniky*, ktoré sa týkajú vlnovej funkcie a preformulujeme ich do našej predstavy o pohybe fiktívneho bodu vo fázovom priestore. Na príklade o *jednej symetrickej jame* sa naučíme vytvárať a správne interpretovať obrázky trajektórií. (Pomôže nám pri tom vhodné *preškáľovanie osí*.) Na záver zistíme, aké *grafické riešenia* pre hodnoty energií viazaných stavov vyplývajú z našej metódy.

2.1 Všeobecné základy

Trajektórie vo fázovom priestore musia správne odrážať požiadavky kvantovej mechaniky. Týmito dvoma kľúčovými požiadavkami sú *normovateľnosť* vlnovej funkcie a jej *spojitosť*, spolu so spojitosťou jej prvej derivácie. Tomuto sa venuje podčasť (2.1.1). V ďalšej podčasti sa podrobne rozoberá vhodné škáľovanie osí vo fázovom priestore. To umožní kresliť prehľadné obrázky pre celú oblasť potenciálu.

2.1.1 Vlastnosti vlnovej funkcie

V predošlej kapitole sme zistili, že v klasicky dostupnej oblasti sú trajektóriami kružnice a elipsy. Po vhodnom preškáľovaní osí (2.2) sa z elíps stanú kružnice, takže v tomto zmysle to vždy budú kružnice. V klasicky nedostupnej oblasti nám ako trajektórie vyšli hyperboly (a špeciálne aj ich asymptoty). Celý potenciál bude obsahovať oba typy oblastí, takže celková trajektória sa bude musieť poskladať z týchto dvoch typov kriviek. Na toto skladanie sú však striktné obmedzenia dané štandardnými požiadavkami z kvantovej mechaniky. Čo teda musí platiť pre celkovú trajektóriu vo fázovom priestore?

Po prvé, z kvantovej mechaniky vieme, že (pre potenciály s konečným počtom konečných skokov) vlnová funkcia pre viazaný stav musí byť spojitá spolu so svojou prvou deriváciou. Naše obrázky sú tvorené krivkami vo fázovom priestore $(\psi, v) = (\psi, \dot{\psi})$, takže my priamo nanášame hodnoty pre ψ a $\dot{\psi}$ a teda spojitosť dvoch funkcií u nás znamená *spojitosť len jednej krivky – hľadanej trajektórie*.

Ak skok potenciálu nebude konečný, tak kvantová mechanika hovorí, že derivácia vlnovej funkcie nemusí byť spojitá. U nás to znamená nespojitosť trajektórie (jej skok vo vertikálnom smere). O tomto efekte sa presvedčíme v časti (3.1) o nekonečnej jame.

Po druhé, aby vlnová funkcia mohla popisovať reálnu časticu vo viazanom stave, musí byť správne normovaná. Ako vieme, kvadrát vlnovej funkcie je hustotou pravdepodobnosti, ktorá po preintegrovaní má dať jednotku.¹ Tento integrál teda nesmie byť divergentný.

Ako sa táto vlastnosť prejavuje na tvare vlnovej funkcie? Jej konce nesmú utekať do nekonečna a majú vykazovať (exponenciálny) pokles. Ak má byť hodnota vlnovej funkcie v nekonečne nulová, tak musí byť nulová aj jej derivácia. Pre obrázok vo fázovom priestore z toho vyplýva podmienka, že začiatkové časti trajektórie musia *vychádzať* z počiatku – bodu, kde $(\psi, \dot{\psi}) = (0, 0)$, pričom koncové časti trajektórie tam musia *vchádzať*.² Pre časy $\tau = \pm\infty$ sa teda častica *limitne blíži* do počiatku (sprava alebo zľava).

2.1.2 Škálovanie osí

Prípady $k > 0$ a $k < 0$ osobitne

V podčastiach (1.3.2) sme videli, ako sa nám pre rôzne hodnoty konštanty k integrálne krivky – kružnice menili na rôzne elipsy. Čo by sme mali spraviť, ak by sme chceli zachovať tvar *kružníc*?

Uvažujme nasledujúce *škálovanie osí*

$$(\psi, v) \longrightarrow \left(\psi \equiv x, \frac{v}{\omega_1} \equiv y\right). \quad (2.1)$$

Pre rotácie teda dostaneme takýto tvar rovníc

$$\dot{x} = \omega_1 y \quad (2.2)$$

$$\dot{y} = -\frac{k}{\omega_1} x. \quad (2.3)$$

Aby riešením takejto sústavy rovníc bol pohyb po kružnici, musia byť koeficienty pri y a x na pravých stranách rovnaké. Dostávame teda podmienku $\frac{k}{\omega_1} = \omega_1$, z ktorej nám pre škálovací faktor vychádza

$$\omega_1 = \sqrt{k}. \quad (2.4)$$

Získame tak riešenie v tvare

$$\begin{pmatrix} x(\tau) \\ y(\tau) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\omega_1 \tau) & \sin(\omega_1 \tau) \\ -\sin(\omega_1 \tau) & \cos(\omega_1 \tau) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

¹Poznamenajme, že naše riešenia nebudú normované na jednotku, zistíme ich však s presnosťou na konštantný násobok, a to nám stačí.

²Je bezpečnejšie používať slová ako *vychádzať* a *smerovať*, nie (názornejšie) *začínať* a *končiť*. Keby totiž častica naozaj mala začínať svoj pohyb v počiatku, nikam by sa nepohla – tento bod je totiž stabilný. Znamená to, že $(0, 0)$ je riešením sústavy (1.14) a (1.15).

ktoré môžeme porovnať s riešením (1.10) v podčasti (1.2.1). Vidíme, že v rovnici (ako) pre y nám už nezavádzajú faktory \sqrt{k} , ktoré nám kazili tvar kružníc. V súradniciach (x, y) sú teda našim riešením integrálne krivky – kružnice, po ktorých sa obieha uhlovou rýchlosťou ω_1 .

Podobne aj pri hyperbolických rotáciách nám „nejednotková“ hodnota konštanty k kazí obrázky *hyperbol*, tak ako vidno na Obr. 1.2 v podčasti (1.3.3). Ak by sme chceli docieľiť, aby boli asymptoty hyperbol na seba kolmé, urobíme nasledujúce škálovanie osí

$$(\psi, v) \longrightarrow (\psi \equiv \hat{x}, \frac{v}{\omega_2} \equiv \hat{y}). \quad (2.6)$$

Dostávame podobnú podmienku ako (2.4) a síce $\omega_2 = \sqrt{k}$ a riešenie v tvare

$$\begin{pmatrix} \hat{x}(\tau) \\ \hat{y}(\tau) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh(\omega_2\tau) & \sinh(\omega_2\tau) \\ \sinh(\omega_2\tau) & \cosh(\omega_2\tau) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{x}_0 \\ \hat{y}_0 \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Riešením takto budú integrálne krivky hyperboly s kolmými asymptotami, pričom pohyb po nich je daný „uhlovou rýchlosťou“ ω_2 .

Prípady $k > 0$ a $k < 0$ spolu

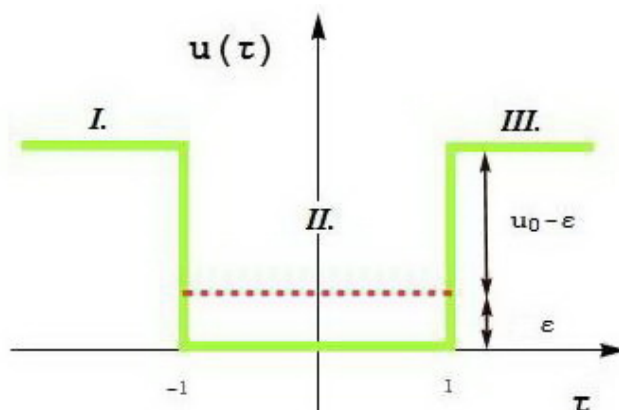
Prečo sme škálovanie skúmali osobitne pre rotácie a hyperbolické rotácie? Spomeňme si, že hyperbolický pohyb súvisí s oblasťou mimo jám a rotačný s oblasťou vnútra jám. Konštantu k je rozdielom celkovej a potenciálnej energie a je teda *iná* pre vnútro jamy a jej okolie. Preto, ak chceme trajektóriu pre všetky hodnoty τ kresliť do jedného obrázku tak, aby bola spojitá, musíme sa rozhodnúť, ktoré tvary chceme zachovať. Máme dve možnosti: môžeme škálovať „na kružnice“ alebo „na hyperboly“. Čo je výhodnejšie?

Škálovanie vždy ovplyvňuje dve veci: rýchlosť pohybu a tvar trajektórie. Neskôr sa ukáže, že uhlové rýchlosti budú závisieť od energie. V prípade zvyšujúcej sa energie teda *škálovanie na kružnice* prináša zrýchľovanie pri pohybe po kružniciach a spomalenie na hyperbolách, ktorých asymptoty už nebudú na seba kolmé. Pri *škálovaní na hyperboly* síce asymptoty ostanú kolmé, ale zrýchľovanie/spomaľovanie ostáva, tentokrát však po elipsách. Čo si teda vybrať? Ak sa energia nezvyšuje, ľahšie predstavitel'ný je určite rovnomerný pohyb po kružnici, nie po elipse (o zrýchľovaní nehovoriac). Čiže prakticky realizovateľný je iba prípad škálovania na kružnice. Okrem toho, obrázky škálované na kružnice vyzerajú prehľadnejšie a krajšie.

Ako teda postupovať, aby sme trajektóriu mohli kresliť do jedného obrázku? Aby sme rozlíšili, že škálovanie je rôzne pre rôzne oblasti, používali sme nestrieškované súradnice pre kružnice a strieškované pre hyperboly. Rozhodli sme sa pre nestrieškované. Nesmieme však zabudnúť, že pôvodné súradnice (ψ, v) sú stále tie isté. Potom zo škálovacích vzťahov (2.1) a (2.6) dostávame nasledujúce podmienky

$$(\psi = x \wedge \psi = \hat{x}) \quad \Rightarrow \quad x = \hat{x} \quad (2.8)$$

$$(v = \omega_1 y \wedge v = \omega_2 \hat{y}) \quad \Rightarrow \quad y = \frac{\omega_2}{\omega_1} \hat{y}. \quad (2.9)$$



Obr. 2.1: Jedna jama: Potenciál

2.2 Čo spôsobí škálovanie osí pre jednu jamu

Podme sa teda pozrieť, čo konkrétne sa bude diať v úlohe o jednej jame. Máme potenciál ako na Obr. 2.1. Ako prirodzenú dĺžkovú škálu L_0 sme si teda vybrali (polovicu) šírky jamy.

Oblasť potenciálu sa skladá z troch častí. Po „bezrozmernení“ sa jedinou relevantnou veličinou na popis jamy stala jej hĺbka – konštanta u_0 . Preto aj celkovú energiu \mathcal{E} vieme popísať ako nejaký jej násobok, najjednoduchšie ako $\mathcal{E} = eu_0$. Konštanta e potom predstavuje energiu v jednotkách hĺbky jamy. Hodnoty e sa pre viazané stavy pohybujú v rozmedzí $e \in (0, 1)$.

Potom sa konštanta k , ako rozdiel celkovej a potenciálnej energie, dá pre tri intervaly potenciálu vyjadriť ako

$$k = \begin{cases} eu_0 > 0 & \text{oblasť II. } \tau \in (-1, 1) \\ u_0(e - 1) < 0 & \text{oblasti I. a III. } \tau \notin (-1, 1), \end{cases} \quad (2.10)$$

pričom význam týchto dvoch od energie závislých konštánt vidno na Obr. 2.1.

V podčasti (2.1.2) sme uviedli, že sa budeme držať možnosti škálovania na kružnice a dospeli sme ku transformačným vzťahom (2.8) a (2.9). Vieme, že asymptoty hyperbol by ostali nezmenené v strieškovaných súradniciach. Tam by ich rovnice boli $\hat{y} = \pm \hat{x}$. Na základe spomínaných transformačných vzťahov a vyjadrení v (2.10) tieto rovnice prejdú v nestrieškovaných súradniciach na³

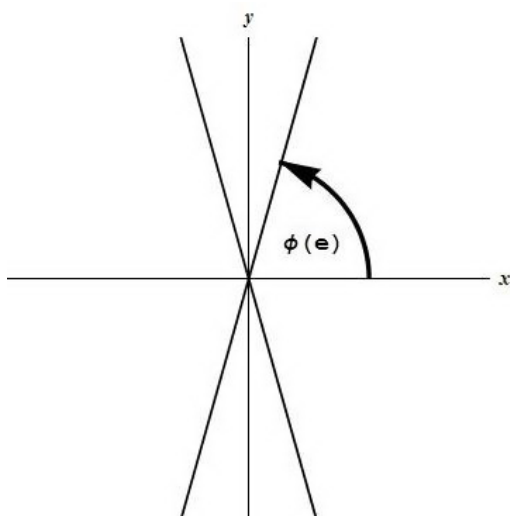
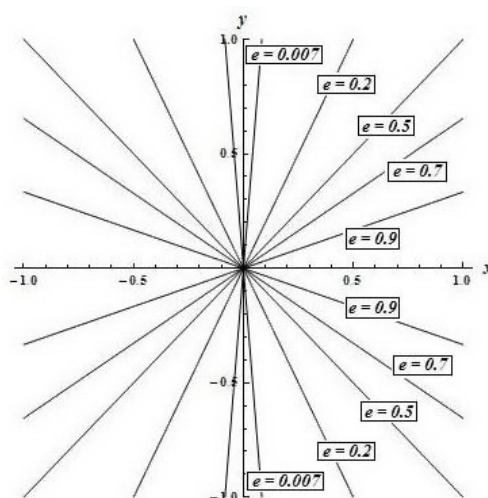
$$y = \pm \frac{\omega_2}{\omega_1} x = \pm \sqrt{\frac{u_0(1-e)}{u_0 e}} = \pm \sqrt{\frac{1-e}{e}} x. \quad (2.11)$$

Vidíme, že sklon asymptot sa stal závislým od energie. Na popis tohoto sklonu môžeme zaviesť uhol $\Phi(e)$ ako⁴

$$\Phi(e) = \arctan \sqrt{\frac{1-e}{e}}. \quad (2.12)$$

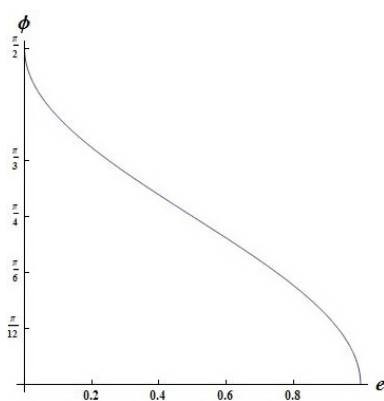
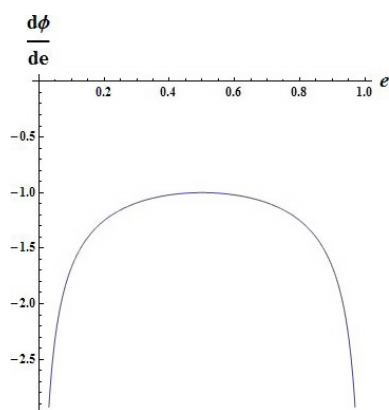
³koho mylí opačné znamienko v čitateli, nech si spomenie, že žiadané mínus získame dosadením do sústavy DR)

⁴viď aj Obr. 2.2

Obr. 2.2: Zavedenie uhla $\Phi(e)$ Obr. 2.3: Sklon asymptot pre rôzne e

Aby sme získali lepšiu predstavu, čo sa bude diať s asymptotami, nechali sme si ich vykresliť pre pár vybraných hodnôt konštanty e , tak ako vidno na Obr. 2.3. Asymptoty sa teda s rastúcou energiou budú postupne *sklápať* od osi y pre malé hodnoty e až po os x pre veľké hodnoty e .

Ak by sme chceli vedieť presnejšie ako sa asymptoty sklápajú, mohli sme si nechať vykresliť priebeh uhla Φ v závislosti od parametra energie e , tak ako na Obr. 2.4. Krivka klesá – to sme vedeli, jej sklon sa však mení (v hodnote $e = 0.5$ sa mení z konvexnej na konkávnu). Pre zaujímavosť sa preto pozrime na deriváciu (Obr. 2.5). Vidíme, že úplne na začiatku rýchlosť *zmenšovania* uhla prudko klesne (asi do $e = 0.2$), potom je rovnomerná, až po prekročení $e = 0.5$) sa začne zväčšovať, pričom od hodnoty asi $e = 0.8$ prudko. Mohlo by sa zdať, že to je celé naopak, ale to len preto, lebo sa bavíme o *zápornej* derivácii.

Obr. 2.4: Závislosť $\Phi(e)$ Obr. 2.5: Derivácia $\frac{d\Phi}{de}$

Celkovo potom v nestrieškovaných súradniciach získavame rovnice a ich riešenia ako

- vnútri jamy

$$\begin{pmatrix} \dot{x}(\tau) \\ \dot{y}(\tau) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega_1 y \\ -\omega_1 x \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} x(\tau) \\ y(\tau) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\omega_1 \tau) & \sin(\omega_1 \tau) \\ -\sin(\omega_1 \tau) & \cos(\omega_1 \tau) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

- mimo jamy

$$\begin{pmatrix} \dot{x}(\tau) \\ \dot{y}(\tau) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega_1 y \\ \frac{\omega_2^2}{\omega_1} x \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} x(\tau) \\ y(\tau) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh(\omega_2 \tau) & \frac{\omega_1}{\omega_2} \sinh(\omega_2 \tau) \\ \frac{\omega_2}{\omega_1} \sinh(\omega_2 \tau) & \cosh(\omega_2 \tau) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

2.3 Viazané stavy bez počítania

Skúmame problém zatiaľ (len) v jeho princípoch. Obrázky použité v tejto podčasti síce sú nakreslené počítačom (pre nejaké konkrétne hodnoty parametrov v aplikácii *Jedna jama*), ale rovnako dobre by sa dali nakresliť aj od ruky. Konkrétne čísla – energie viazaných stavov uvedieme neskôr.

2.3.1 Trajektórie

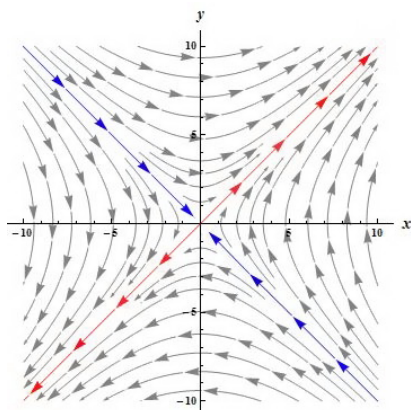
Začneme so **základným stavom**. Aký bude tvar trajektórie? Skombinujeme všetko, čo sme sa už naučili.

Pravidlá pre trajektórie

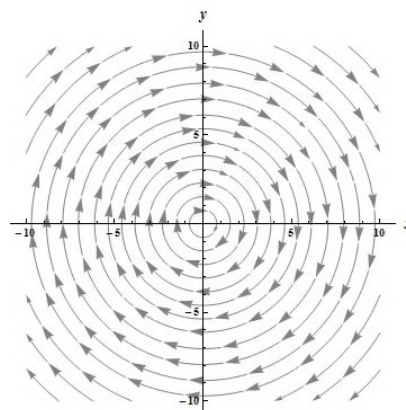
1. jednotlivé časti trajektórie musia na seba pekne nadväzovať
2. trajektória vychádza/vchádza z/do počiatku
3. pre oblasť mimo jamy sme unášaní hyperbolickým tokom
4. pre oblasť vnútra jamy sa nechávame unášať rotačným tokom
5. asymptoty hyperbol sa s rastúcou energiou sklápajú k sebe

Dôležité je uvedomiť si, po akých čiarach sa dostaneme z/do počiatku. Krátky pohľad na Obr. 2.6 nám prezradí, že to môžu byť *jedine asymptoty* hyperbol. Žiadne iné krivky totiž cez počiatok nejdú! Teraz sa treba ešte pozrieť na smer pohybu. Pre *červenú* asymptotu šípky ukazujú z počiatku (od seba) a pre *modrú* do počiatku (k sebe). Prvá časť trajektórie teda musí viesť po červenej asymptote a posledná po modrej. Strednou časťou trajektórie bude jedna z kružníc na Obr. 2.7.

Turistické pravidlo „tam po červenej, naspäť po modrej“ nám mimochodom dáva dve možnosti výberu. Rovnako dobre môžeme na červenej začať vpravo hore ako vľavo dole. Dve rôzne vlnové funkcie, ktoré by nám potom z týchto obrázkov vyplynuli, by sa však líšili len znamienkom (čo je fyzikálne nezaujímavá fáza).



Obr. 2.6: Hyperbolická rotácia



Obr. 2.7: Rotácia

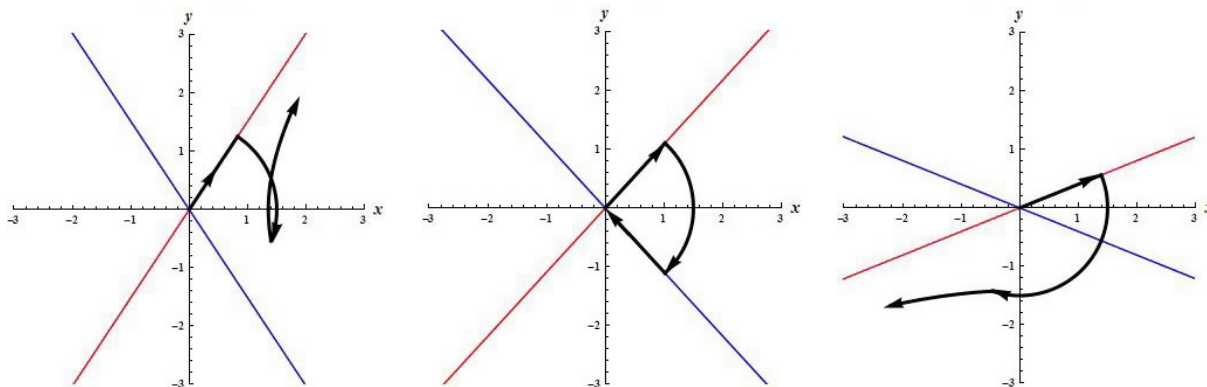
Nasleduje dôkaz zaručenia existencie základného stavu. Celý pohyb teda bude vyzerat takto: častica v čase $\tau = -\infty$ vychádza z počiatku po červenej asymptote, v čase $\tau = -1$ naskočí na kružnicu (cez každý bod ide práve jedna kružnica⁵), na ktorej zotrúva po čas $\tau = 1$, vtedy preskočí na príslušnú hyperbolu a ide ... Kam?

Spomeňme si, že od energie závisí sklon asymptot a uhlové rýchlosti pohybov. Čo je dôležité, rýchlosť krúženia s rastúcou energiou *narastá* ($\omega_1 = \sqrt{u_0 e}$). Existencii základného stavu teda prajú dve veci: s rastúcou energiou to má častica jednak stále bližšie, lebo asymptoty sa k sebe približujú a jednak ide po kružnici stále rýchlejšie. Pre daný potenciál teda *musí* existovať práve taká najmenšia energia e_z (energia základného stavu), že častica za čas $\tau = 2$ prejde uhlovou rýchlosťou $\omega_1(e_z)$ po kružnici *práve* na miesto, kde môže skočiť na modrú asymptotu a vrátiť sa do počiatku.

Ak bude energia menšia ako e_z , častica prejde na hyperbolický pohyb skôr (nedosiahne želanú modrú asymptotu) a odpláva do nekonečna smerom hore doprava (taký je v tomto segmente smer integrálnych kriviek). Ak bude energia väčšia, častica zmešká možnosť naskočiť na modrú asymptotu, prejde na hyperbolu (v spodnom segmente) a do nekonečna odpláva smerom dole vľavo.

Tieto tri možnosti sú zobrazené na Obr. 2.8. Na jeho poslednej časti si môžeme všimnúť ešte jednu dôležitú vec. Zaručený máme skutočne *len jeden* viazaný stav! Pri veľmi (keď chceme, nekonečne) plytkej jame totiž bude viazaný stav existovať len tak tak, energia bude limitne blízko 1 a asymptoty budú už takmer úplne sklopené. Ďalej proste nie je kam ísť. „Vedeckejšie“ to možno zargumentovať takto: Obr. 2.1 nám hovorí, že pre oblasť jamy je potenciál nulový. Zároveň vieme, že celková energia \mathcal{E} musí byť kladná. Z toho samozrejme vyplýva, že aj energia e je kladná. Čo je to základný stav? Je to viazaný stav s *najnižšou* energiou. U nás ho teda indikuje najnižšia možná kladná hodnota e . Z Obr. 2.8 je jasné, že skôr ako vpravo dole sa na modrú asymptotu nedostaneme. Pritom tento stav má nejakú kladnú energiu. Máme teda istotu, že sa jedná o základný stav.

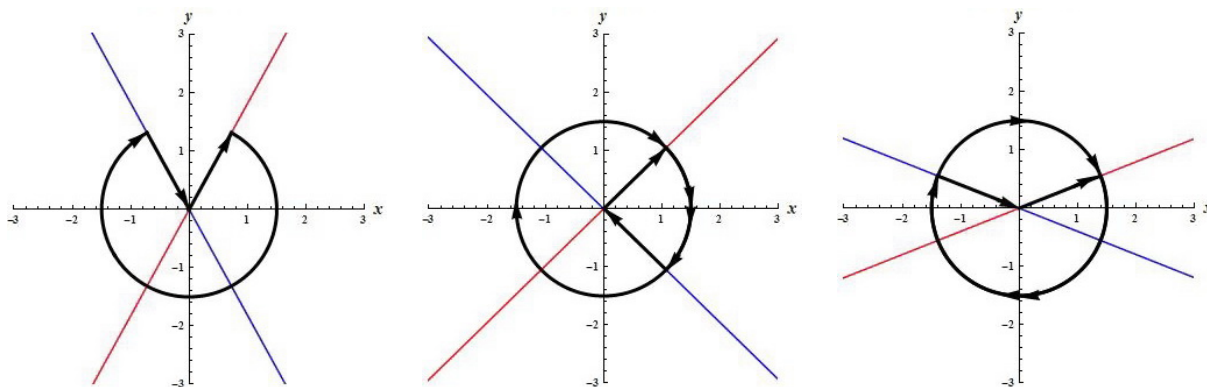
⁵Pre hyperboly to neplatí, existujú dve výnimky. Tými sú práve degenerované hyperboly = asymptoty.

Obr. 2.8: Trajektória častice pre e menšie, rovné a väčšie ako e_z

A čo môžeme vytušiť o **excitovaných stavoch**? Cesta do počiatku je možná *len po modrej asymptote*. Ak je jama dostatočne hlboká, častica stihne spraviť aj viac obehov (nezabúdajme, že uhlová rýchlosť závisí od hĺbky jamy). Pritom vždy, keď bude „míňať“ modrú asymptotu, môže zamieriť do počiatku. Každé takéto míňanie signalizuje jeden viazaný stav. Očakávame preto, že tvar ďalších troch viazaných stavov bude ako na Obr. 2.9. Nakoľko sa druhý a tretí excitovaný stav interpretujú troška ťažšie, zaviedli sme takéto „šípkovanie“: *jedna šípka* označuje buď koniec jedného typu trajektórie a prechod na iný typ (z kružnice na asymptotu alebo naopak), alebo miesto cez ktoré sa má prejsť len raz. *Dve šípky* potom znamenajú, že cez danú krivku treba prejsť dvakrát. Koncové šípky sú umiestnené naozaj na konci a šípky poukazujúce na počet obehov sú vždy v strede príslušnej časti trajektórie.

Pre *prvý excitovaný stav* teda (druhá časť Obr. 2.9) najprv vyjdeme po červenej asymptote, potom pokračujeme po kružnici, modrú asymptotu nechávame bez povšimnutia *dvakrát* a do počiatku zamierime až na tretíkrát. Teda časť kružnice medzi asymptotami *vpravo* musíme prejsť dvakrát (naľavo stačí raz).

Pre *druhý excitovaný stav* je situácia podobná, až nato, že teraz využijeme možnosť návratu do počiatku až na štvrtýkrát. Pri tom oblasť kružnice medzi asymptotami *dole* prechádzame dvakrát (hore stačí raz).



Obr. 2.9: Ďalšie tri viazané stavy pre jednu jamu

2.3.2 Vlnové funkcie alebo ako správne „čítať“ obrázky

Vyjadrenia vlnových funkcií sú samozrejme dané presne – prvými riadkami z riešení (2.14) a (2.13). Každá vlnová funkcia (pre jednu jamu) sa bude skladať z troch častí.

Pre oblasti potenciálu *I.*, *II.* a *III.* teda postupne dostávame

$$\psi(\tau) \equiv x(\tau) = \begin{cases} \cosh(\sqrt{u_0(1-e)}\tau)x_0 + \sqrt{\frac{1-e}{e}} \sinh(\sqrt{u_0(1-e)}\tau)y_0 \\ \cos(\sqrt{u_0e}\tau)x_1 + \sin(\sqrt{u_0e}\tau)y_1 \\ \cosh(\sqrt{u_0(1-e)}\tau)x_2 + \sqrt{\frac{1-e}{e}} \sinh(\sqrt{u_0(1-e)}\tau)y_2. \end{cases} \quad (2.15)$$

Dvojice bodov (x_0, y_0) , (x_1, y_1) a (x_2, y_2) vždy označujú koncové body predošlej a začiatkové body aktuálnej časti trajektórie. Častica teda začína v bode (x_0, y_0) , putuje po modrej asymptote po $\tau = -1$, pričom tento bod označíme (x_1, y_1) . V bode (x_1, y_1) častica naskočí na kružnicu a v bode (x_2, y_2) , ktorý zodpovedá $\tau = 1$ prejde na červenú asymptotu.

Pre vlnovú funkciu tieto body nemajú priamy význam, slúžia len ako počiatkové podmienky. Napríklad v čase $\tau = 0$ vypadnú všetky členy so sínusmi a hyperbolickými sínusmi, a hodnota vlnovej funkcie v bode $\tau = 0$ je vyjadrená pomocou konštanty x_1 .

Tvar vlnových funkcií si však veľmi ľahko vieme odvodiť priamo z obrázkov trajektórií. Veľa vlastností pritom vyplýva zo *symetrie potenciálu*. Bodu $\tau = 0$ (stred potenciálu) vždy zodpovedá stredu trajektórie. To však znamená, že tieto dve časti trajektórie musia byť zrkadlovými obrazmi. Podľa toho, či stred trajektórie leží na osi x a lebo na osi y potom budeme mať *párnu* alebo *nepárnu* vlnovú funkciu. Skúsme sa teda pozrieť na prvé dva viazané stavy.

Obrázok pre **základný stav** máme na strednej časti Obr. 2.8. Vidíme, že celá trajektória je v oblasti kladného x , to znamená, že vlnová funkcia ($\psi \equiv x$) bude nadobúdať len kladné hodnoty.

Bude funkcia párna alebo nepárna? Trajektória je symetrická podľa osi x . To znamená, že celá pozostáva z dvojíc bodov s rovnakou súradnicou x a opačnou súradnicou y . Rovnaká súradnica x znamená rovnakú výšku vlnovej funkcie. Opačné súradnice y potom znamenajú, že ak na jednej strane vlnová funkcia rastie, tak na druhej bude klesať. A to je presne symetria podľa osi ψ (=párnosť vlnovej funkcie).

Ďalej vidíme, že trajektória raz pretína os x , to je samozrejme nulová hodnota y (=derivácie ψ po preškáľovaní) a znamená extrém. Nakoľko je smer pohybu po kružnici v smere hodinových ručičiek, prechádzame z oblasti s kladným y do oblasti so záporným y . Teda vlnová funkcia musí najprv rásť a potom klesať. Z toho vyplýva, že náš extrém je maximum.

Začiatok a koniec trajektórie (pohyb po asymptotách) predstavuje exponenciálne tlmené „chvosty“ vlnovej funkcie. (Že to je naozaj exponenciálny útlm môžeme vidieť napr. z vyjadrenia (2.15), hyperbolické sínusy a kosínusy sa nám vyskladajú na reálne exponenciály, ktoré predstavujú tlmenie.)

O tom, že správna vlnová funkcia naozaj zodpovedá tomuto opisu sa môžeme presvedčiť pohľadom na prvú časť Obr. 2.12 v ďalšej podčasti.

Trajektóriu pre **prvý excitovaný stav** máme v prvej časti Obr. 2.9. Na prvý pohľad vidno, že vlnová funkcia teraz bude aj kladná, aj záporná.

Z toho, že trajektória je symetrická podľa osi y vyplýva, že každá dvojica s rovnakou súradnicou y má opačnú súradnicu x . Inak povedané, stred trajektórie prechádza cez bod, kde $x = 0$. Dokopy teda dostávame, že budú existovať oblasti vlnovej funkcie s opačnými hodnotami, ale rovnakými vlastnosťami (rastúcnosť alebo klesajúcnosť), ktoré budú symetricky rozmiestnené okolo počiatku. Toto je presne bodová symetria (=nepárnosť vlnovej funkcie).

Os x teraz prechádzame dvakrát, budeme mať teda dva extrémny. Zo smeru pohybu preto znova vyplýva, že prvým extrémom bude maximum a druhým minimum.

Suma – sumárum by mala vlnová funkcia vyzeráť takto. Z nuly v mínus - nekonečne rastie v kladných hodnotách na maximum, potom klesá symetricky cez stred do záporného minima (rovnakej výšky!) a nakoniec rastie k nule v plus - nekonečne, s tým že ostáva pod osou τ . O správnosti tohoto výsledku nás môže presvedčiť pohľad na druhú časť Obr. 2.12.

Pravidlá správneho „čítania obrázkov“

1. máme symetrický potenciál, teda aj obrázky musia byť (nejakým spôsobom) symetrické
2. prvá/druhá polovica trajektórie zodpovedá záporným/kladným τ
3. symetria podľa osi x/y vedie na párnú/nepárnu vlnovú funkciu
4. oblasť nad/pod osou x je oblasťou, kde je kladná/záporná derivácia vlnovej funkcie, čo znamená rast/pokles vlnovej funkcie
5. oblasť napravo/nalavo od osi y je oblasťou kladných/záporných hodnôt vlnovej funkcie
6. každé pretnutie zdola - hore/zhora - dole osi x je nulovým bodom derivácie, a teda *minimum/maximom* vlnovej funkcie
7. počet pretnutí = poradové číslo viazaného stavu⁶

2.4 Viazané stavy – konkrétne hodnoty

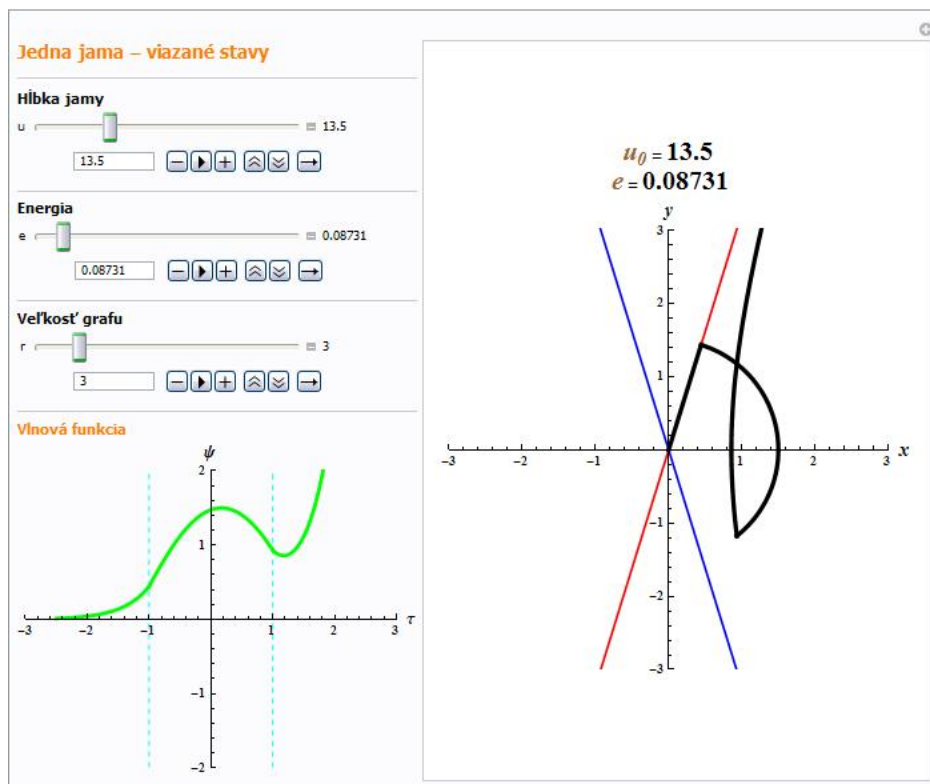
2.4.1 Cesty a vlnové funkcie

V systéme *Mathematica* je možné vytvoriť interaktívnu aplikáciu, ktorej rozhranie vyzerá ako na Obr. 2.10. Sliderni si môžeme nastavovať tri parametre: hĺbku jamy u (to je naša konštanta u_0), energiu e a veľkosť grafu r (čím je rozsah obrázku menší, tým ľahšie a presnejšie vieme doladiť energiu)⁷.

Postup pri hľadaní viazaných stavov je potom nasledovný: najprv si zvolíme hĺbku jamy, potom zvyšujeme parameter e a pozeráme sa, čo sa deje vo fázovom priestore. Na slider reaguje aj vlnová funkcia, ktorá vždy zodpovedá aktuálnej trajektórii. Keď sa dostatočne

⁶Viac v podčasti (2.4.2)

⁷To sa v podstate využíva až pri zložitejších úlohách; tu je len kvôli jednotnosti všetkých aplikácií.

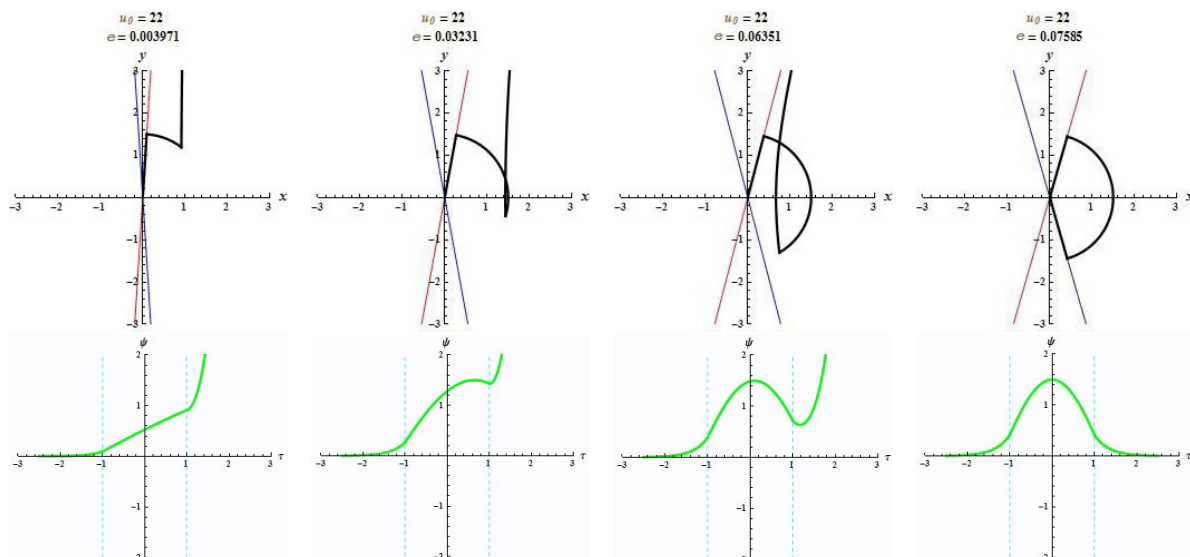
Obr. 2.10: Aplikácia *Jedna jama – viazané stavy*

priblížime k modrej asymptote (t.j. k viazanému stavu), energiu môžeme jemnejšími krokmi vyladiť pomocou tlačítok alebo ručne vpísaním do okienka. Správny viazaný stav nám potom indikuje uzavretá krivka trajektórie a vlnová funkcia, ktorej „chvosty“ sú pekne prilepené k osi τ .

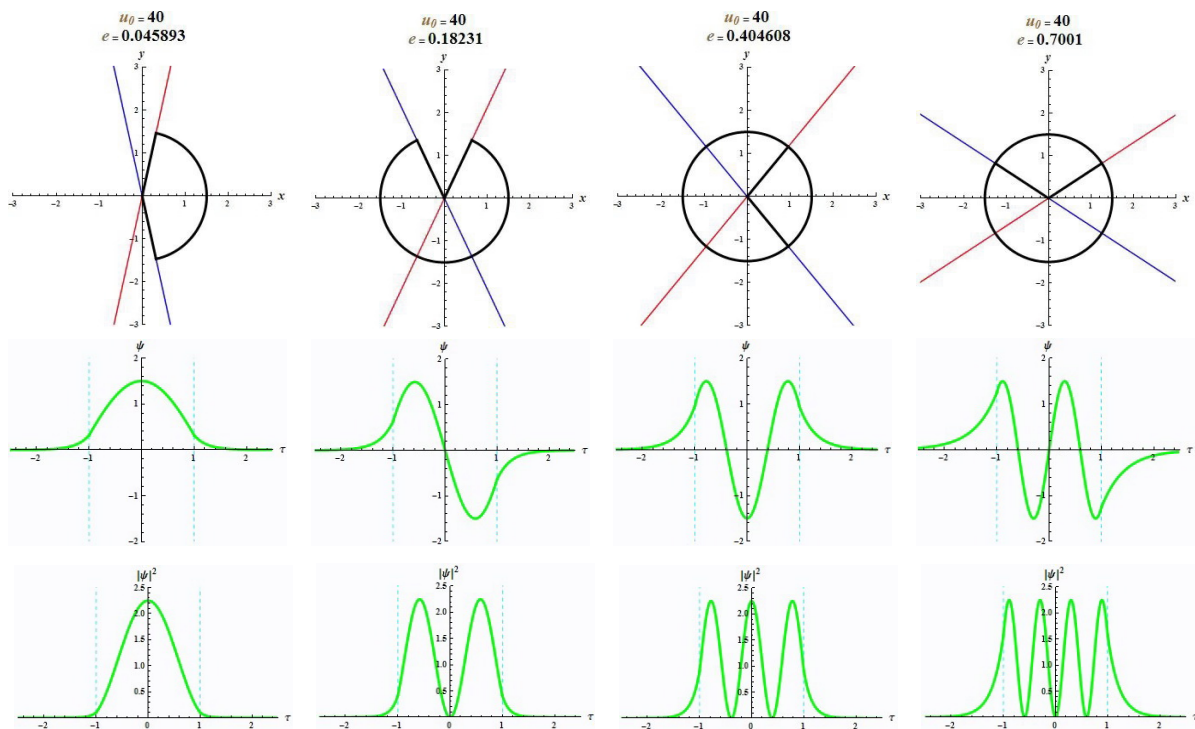
Ako by vyzerala cesta – hľadanie základného stavu, príslušné vlnové funkcie a energie pre jamu s hĺbkou $u = 22$ si môžeme pozrieť na Obr. 2.11. Na Obr. 2.12 je prehľadné zhrnutie trajektórií, vlnových funkcií a hustôt pravdepodobnosti pre prvé štyri viazané stavy jamy s hĺbkou $u = 40^8$.

Trocha viac o *Mathematice* a tvorbe aplikácií v nej sa čitateľ môže dozvedieť v Dodatku C.

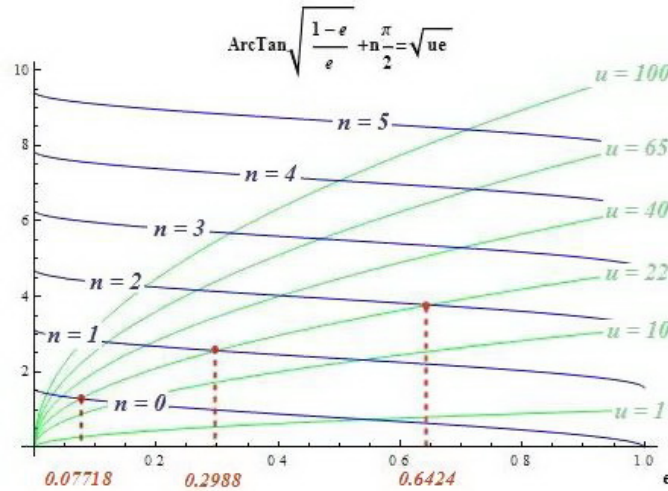
⁸Tá predošlá mala totiž iba tri viazané stavy.



Obr. 2.11: Jedna jama: Cesta k základnému stavu



Obr. 2.12: Jedna jama: Prvé štyri viazané stavy



Obr. 2.13: Jedna jama: Grafické riešenie pre energie viazaných stavov

2.4.2 Výpočet energií

Spomeňme si, ako sme zaviedli uhol Φ (Obr. 2.2). Potom pri pohľade na Obr. 2.12 môžeme odhaliť jednoduchú podmienku pre viazané stavy. Viazaný stav nastane práve vtedy, keď po kružnici prejdeme presne od jednej asymptoty k druhej. Pre základný stav musíme prejsť uhol 2Φ , pre prvý excitovaný stav o pol kružnice viac, čiže $2\phi + \pi$. Pre každý vyšší vždy znova o π viac. Pritom sa po kružnici pohybujeme uhlovou rýchlosťou ω_1 počas $\tau = 2$ sekúnd. Prejdeme teda uhol $\omega_1\tau = \omega_1 2$. Jeden uhol sa musí rovnať druhému, a tak dostávame podmienku

$$2\Phi + n\pi \stackrel{!}{=} 2\omega_1. \quad (2.16)$$

Pritom, keď dosadíme vyjadrenie uhla ϕ podľa (2.12) a $\omega_1 = \sqrt{u_0 e}$, dostaneme transcendentnú rovnicu pre energie ako

$$\arctan \sqrt{\frac{1-e}{e}} + \frac{\pi}{2} n = u_0 e. \quad (2.17)$$

Grafické riešenie rovnice (2.17) potom bude vyzeráť tak, ako na Obr. 2.13. Je to teda *iné* grafické riešenie, s akým sa väčšinou stretávame v knižkách (Napríklad teda aj v [4] a [7].) Porovnaním so vzťahmi (B.11) a (B.12) vidíme, že teraz vlastne riešime inverznú rovnicu.

Ľavá strana rovnice – arcustangensy, sú vykreslené modrou pre rôzne hodnoty n . Zelenou sú vykreslené odmocniny pre rôzne hĺbky jám. Každý priesečník týchto dvoch typov kriviek je jeden viazaný stav. Vidíme, že napríklad pre jamu hĺbky $u = 22$ máme tri viazané stavy (=červené priesečníky). Keď ich e - súradnicu vynásobíme 22 dostaneme energiu viazaného stavu $\mathcal{E} = u_0 e$.

Výborne znova vidno, ako je zaručený (len a len) základný stav. Keďže krivka arcustangensy klesá z nenulovej hodnoty na nulovú a pritom odmocnina stúpa, „nie je kam ujsť“ a musia sa pretať. Odmocnina však vôbec nemusí stúpať tak prudko, aby pretla aj „vyššie“ arcustangensy, a ďalšie viazané stavy tým pádom nemusíme mať.

ZHRNUTIE Kapitoly 2

Naučili sme sa, že správne trajektórie zodpovedajúce viazaným stavom musia byť spojité. Takéto trajektórie tiež musí začínať a končiť v počiatku fázového priestoru, aby vlnové funkcie boli správne normované.

Aby sme trajektórie mohli kresliť do jedného obrázku, musíme si vybrať škálovanie osí fázového priestoru. Výhodnejším sa ukazuje byť škálovanie na kružnice. Takto máme zachovaný tvar kružníc, ale asymptoty hyperbol sa budú so zvyšujúcou sa energiou sklápať.

Pre konkrétny potenciál jednej konečnej jamy máme trajektóriu poskladanú z troch kúskov. Na prvom častica vyjde z počiatku po jednej z asymptot, na druhom sa dve sekundy pohybuje po kružnici a na treťom zamieri po druhej asymptote do počiatku.

Počet viazaných stavov závisí od hĺbky jamy. Čím je jama hlbšia, tým viac obehov častica stihne spraviť, kým sa jej asymptoty sklopia. Návrat do počiatku jej pritom umožňuje modrá asymptota. Každý takýto (možný) návrat znamená ďalší viazaný stav.

Hodnoty energií nám môže poskytnúť aj grafické riešenie (transcendentnej) rovnice pre rovnosť uhlov. Uhlami, ktoré sa musia rovnať, sú úsek kružnice, ktorý prešla častica a uhol medzi červenou (počiatočnou) a modrou (koncovou) asymptotou.

Nakoľko su osami fázového priestoru priamo vlnová funkcia a jej (preškálovaná) derivácia, tak tvary vlnových funkcií si vieme pohodlne odvodiť priamo z obrázkov pomocou jednoduchých pravidiel, ktoré vyplývajú z analýzy tvaru funkcie pomocou jej derivácie.

Zovšeobecnením všetkých pravidiel, ktoré sme sa naučili, sa zaoberá Kapitola 3.

Kapitola 3

Zložitejšie potenciály

Na úvod si v krátkosti spomenieme limitu konečnej jamy, a to nekonečnú jamu. Potom sa presunieme k zaujímavejším a mierne zložitejším (samozrejme stále po častiach konštantným) potenciálom dvoch a troch jám.

Aký bude všeobecný postup, ako si poradiť so zložitejšími potenciálmi? Každéj časti, na ktorej je potenciál konštantný, zodpovedá nejaká konštanta k . Znova budeme mať dva typy konštant (kladné a záporné) pre dva typy trajektórií (kružnice a hyperboly). Jamy však môžu byť rôzne hlboké, prípadne okolo nich môžu byť aj bariéry. Anomálie teda predstavujú vyššie oblasti potenciálu mimo jám a plytšie oblasti potenciálu vnútra jám. Škálovať sa bude vzhľadom na jamu (jamy) najväčšej hĺbky. Každá oblasť s „anomálnym“ potenciálom bude pritom mať vlastné preškálovanie.

3.1 Nekonečná jama

3.1.1 Sklon asymptot

Potenciál máme skoro taký istý ako na Obr. 2.1 – naše u_0 je totiž teraz ∞ . Zaujímajme sa, ako (či) sa s pribúdajúcou energiou budú sklápať osi asymptot. Skúmajme teda závislosť uhla Φ od energie

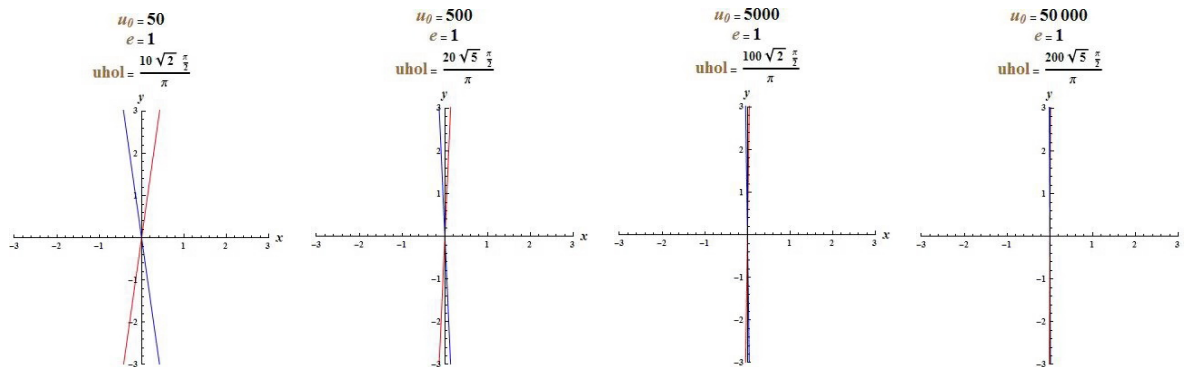
$$\Phi(e) = \arctan \sqrt{\frac{1-e}{e}} = \arctan \sqrt{\frac{u_0 - \mathcal{E}}{\mathcal{E}}}. \quad (3.1)$$

Vzťah (3.1) v limite $u_0 \rightarrow \infty$ prejde na

$$\lim_{u_0 \rightarrow \infty} \arctan \sqrt{\frac{u_0 - \mathcal{E}}{\mathcal{E}}} \approx \lim_{u_0 \rightarrow \infty} \arctan \sqrt{\frac{u_0}{\mathcal{E}}} = \frac{\pi}{2}. \quad (3.2)$$

Vidíme teda, že uhol Φ v limite nekonečnej jamy *nezávisí* od energie a asymptoty sa nám *nebudú* sklápať.

Mohlo by nás zaujímať, pri akej hodnote bezrozmernej hĺbky jamy už tento jav je pozorovateľný (obrázky pre naozaj nekonečnú jamu sa totiž naprogramovať nedajú). Vyskúšali



Obr. 3.1: Nekonečná jama: Sklon asymptot pre rôzne hĺbky

sme hodnoty $u_0 = 50, 500, 5000, 50000$. Výsledky vidno na Obr. 3.1. O nepresnosti nám hovorí hodnota „uhol“¹. Ten by totiž pre nekonečnú jamu mal byť nejakým nepárnym násobkom $\frac{\pi}{2}$.

3.1.2 Viazané stavy

V čom sa budú líšiť obrázky viazaných stavov od prípadu konečnej jamy? Musíme si uvedomiť, že náš potenciál teraz *nemá* konečný skok. Kvantová mechanika požaduje pre vlnovú funkciu podmienku, aby bola mimo oblasti nekonečnej jamy nulová², pri tom vnútri je riešenie presne dané (sínusy a kosínusy). Vlnová funkcia stále musí byť spojitá, čo sa nedá docieľiť inak, ako tak, že v krajných bodoch jamy bude *zalomená* (nemôže naväzovať hladko). A zalomenosť funkcie je to isté ako nespojitosť jej derivácie.

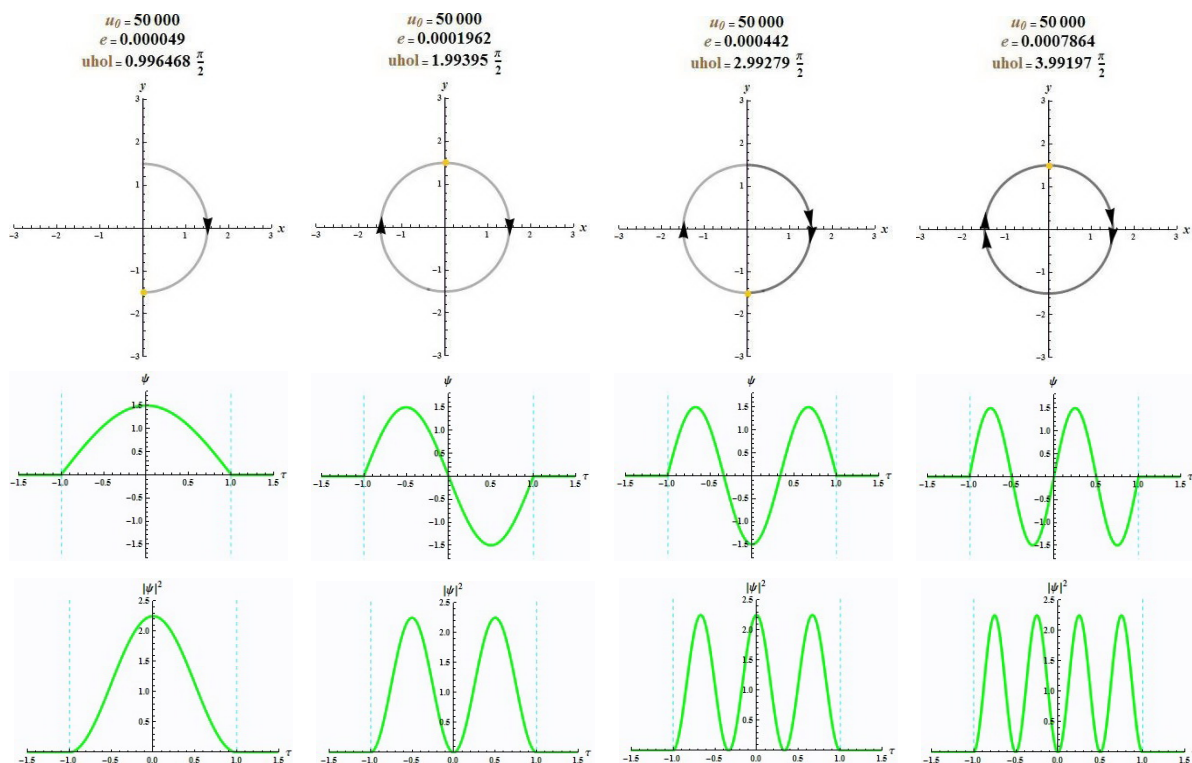
A práve nespojitosť derivácie spôsobí ďalšiu zmenu na obrázkoch. Stále platí, že trajektória začína a končí v počiatku. Prvá časť trajektórie by mala „hyperbolická“ a mala by zodpovedať oblasti mimo jamy. Predtým sme šli po asymptote, tie tu stále máme, ale nesklápajú sa nám. Na rozdiel od konečnej jamy však teraz častica skočí z počiatku *rovno* na pohyb po kružnici. Prečo? Lebo pre čas $\tau \in (-\infty, -1)$ sú nulové aj vlnová funkcia aj jej derivácia, ale práve v bode $\tau = -1$ je vlnová funkcia zalomená a jej derivácia nespojitá. Teda keď sa budeme dívať na os y tak, miesto spojitého prekrížnutia z počiatku na kružnicu uvidíme prázdne miesto – skok.

Ako vieme z QM, tak vlnové funkcie pre viazané stavy sú v prípade nekonečnej jamy (centrovanej na stred) lineárne kombinácie sínusoviek a kosínusoviek „nasúkané“ v oblasti vnútra jamy. Že to je práve takto, môžeme vidieť aj z obrázkov trajektórií (Obr. 3.2).

Pri konečnej jame sme viazané stavy mali vždy vtedy, ak sa častica mohla po modrej asymptote dostať do počiatku. K modrej asymptote bolo treba doplávať určitú (presnú) vzdialenosť po kružnici. Celé to záviselo od toho, kam asymptota stihla častici pri zvyšovaní energie „utiecť“. Teraz nám však asymptoty nikam neutekajú a stále sú takpovediac totožné s osou y . Viazaný stav teda budeme mať vždy vtedy, keď častica bude míňať os y , čo je na jej dráhe zakaždým, keď prejde uhol $\frac{\pi}{2}$. Vtedy (a len vtedy) totiž môže *skočiť* do počiatku. Pre prvé štyri viazané stavy teda podľa očakávania dostávame obrázky ako na Obr. 3.2.

¹Teraz ho meriame od osi y .

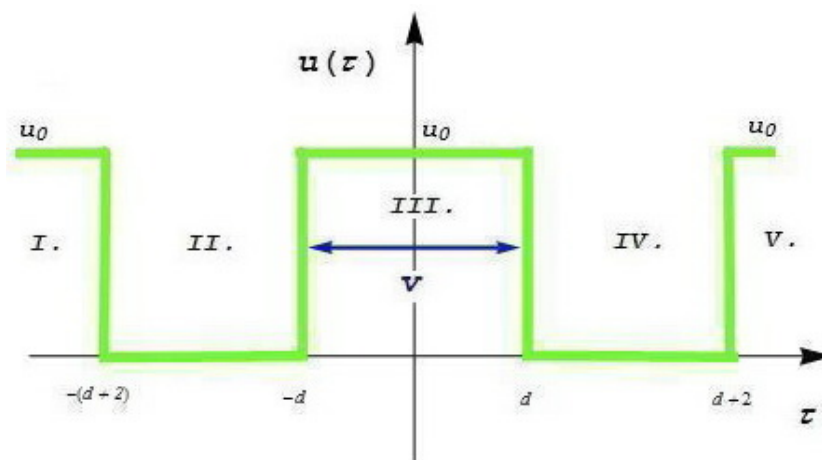
²Do oblasti s *nekonečným* potenciálom nemôže tunelovať dokonca ani kvantová častica.



Obr. 3.2: Nekonečná jama: Prvé štyri viazané stavy

Znova sme použili „šípkovanie“. Teraz však máme iba jeden typ trajektórie – kružnicu. Preto počet šípiek teraz označuje naozaj len počet obehov v príslušnej *polkružnici*. Kam sa častica dostala, ukazuje oranžová guľôčka.

Na Obr. 3.2 si znova môžeme všimnúť, že uhly ktoré častica reálne prešla, nie sú presne násobkami $\frac{\pi}{2}$. To je spôsobené jednak tým, že náš potenciál nie je naozaj nekonečný a jednak tým, že energiu sme nastavovali podľa toho, čo sme videli na obrazovke počítača (a teda s konečnou presnosťou). Z QM poznáme presné riešenie (pre naozaj nekonečný prípad!), energie viazaných stavov sú $\propto n^2$, takže naša metóda teraz vlastne dáva horšie výsledky ako tradičný výpočet z QM. Zaujímavé skôr je, že *aj* tento prípad sa cez našu metódu dá pekne vysvetliť.



Obr. 3.3: Dve jamy základ: Potenciál

3.2 Dve jamy

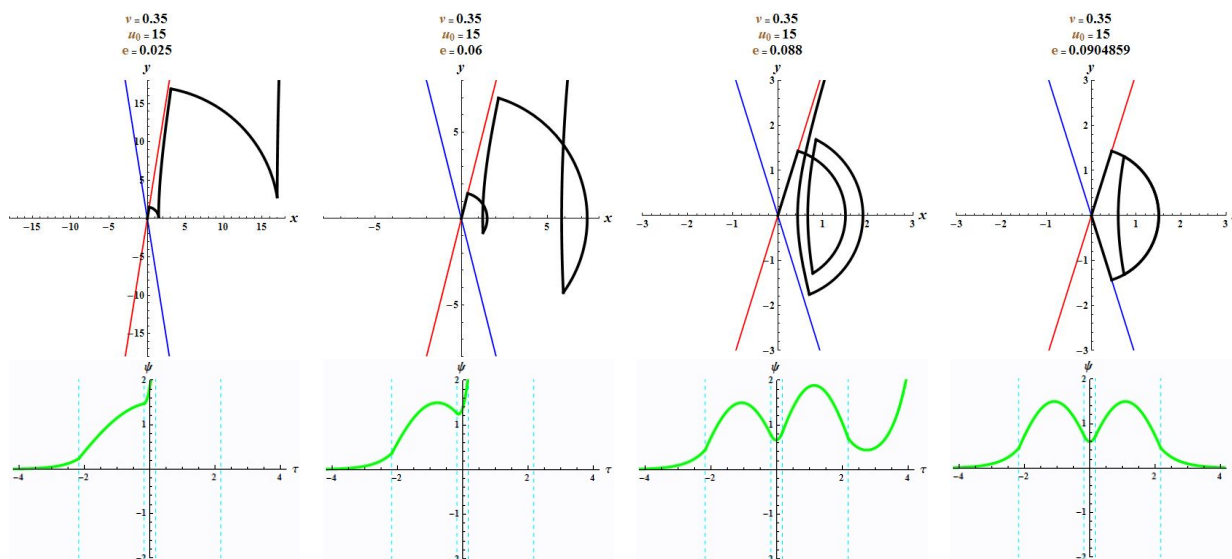
Už potenciál s dvomi jamami nám dáva hodne nových možností. V nasledujúcej časti sa budeme zaoberať dvomi symetrickými a dvomi nesymetrickými konfiguráciami potenciálu. Najprv budeme skúmať najjednoduchšie dve jamy. Zaujímavé efekty už vznikajú aj tu – pri ich *oddalovaní*. Potom zvýšime strednú oblasť medzi jamami, a zistíme, ako prítomnosť takejto *bariéry* ovplyvní viazané stavy. Pozrieme sa aj na nesymetrickú situáciu bariéry v poslednej oblasti potenciálu napravo a znova preskúame, ako sa s jej zvyšovaním budú meniť viazané stavy. Na záver preskúame aj najzložitejší prípad dvoch jám s *rôznou hĺbkou*.

3.2.1 Základná konfigurácia

Majme potenciál ako na Obr. 3.3. Jedná sa teda o dve rovnako hlboké, rovnako široké a symetricky umiestnené jamy so vzájomnou vzdialenosťou $v = 2d$. Vzniká nám teda päť oblastí potenciálu. Ako sa v nich bude hýbať fiktívna častica? V oblastiach *I.*, *III.* a *V.* to bude „hyperbolický“ pohyb a v oblastiach *II.* a *IV.* rotačný. Keďže jamy sú rovnako hlboké, a steny medzi nimi rovnako vysoké, príslušné (hyperbolické a rotačné) uhlové rýchlosti sa nebudú meniť.

Viazané stavy

Čo vieme dopredu povedať o tvare trajektórií viazaných stavov? Začiatok a koniec vždy musí vyzeráť rovnako. Častica z počiatku vyjde po červenej a vráti sa doňho po modrej asymptote. Stredná časť pohybu sa však teraz skladá namiesto z jedného až z troch kúskov. Pri jednej jame sme krúžili po kružnici. Teraz vystriedame postupne kružnicu, hyperbolu a znova kružnicu. Prítom na kružniciach znova ostaneme $\tau = 2$ sekúnd. Oblasť *III.* má premennú šírku, po hyperbole teda pôjdeme $\tau = v$ sekúnd. Lepšie sa to dá predstaviť, keď sa pozrieme na Obr. 3.4. V jeho druhej a tretej časti pekne vidno, ako sa striedajú hyperbolické a rotačné časti trajektórie. Z jeho poslednej časti je jasné, že pre viazaný stav sa kružnice musia „zliať“



Obr. 3.4: Dve jamy základ: Cesta k základnému stavu

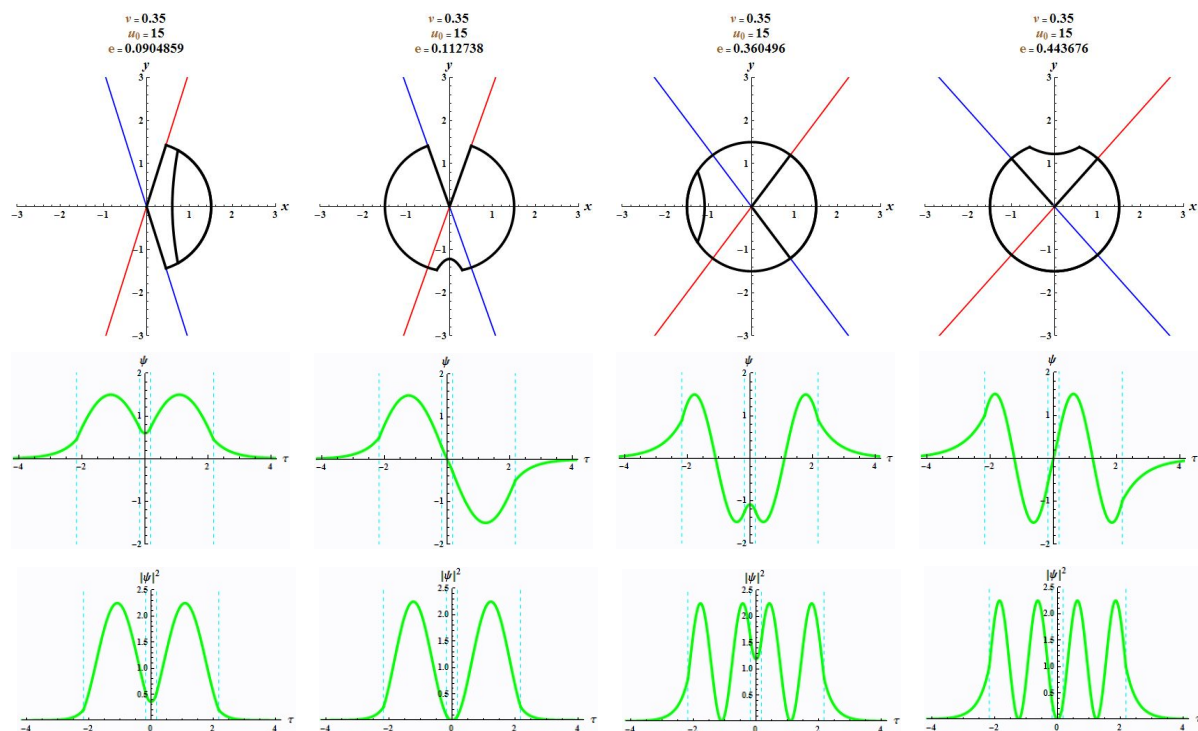
do jednej, aby obrázok bol symetrický. Tiež vidno, že pre zlé stavy nám častica ubehla naozaj ďaleko, aby sme to mohli zachytiť, bolo treba obrázky „oddialiť“.

Náš potenciál je symetrický, to isté očakávame aj od obrázkov viazaných stavov. Na rozdiel od jednej jamy nám však za oblasť *III*. pribudne v strede medzi kružnicami nejaký „oblúčik“ za hyperbolický pohyb. Na Obr. 3.5 si môžeme pozrieť, ako vyzerajú prvé štyri viazané stavy pre jamy hĺbky $u_0 = 15$ so vzájomnou vzdialenosťou $v = 0.35$. V tretej časti Obr. 3.5 si tiež môžeme všimnúť, že reálna častica má v tomto stave najväčšiu pravdepodobnosť tunelovania v oblasti *III*.

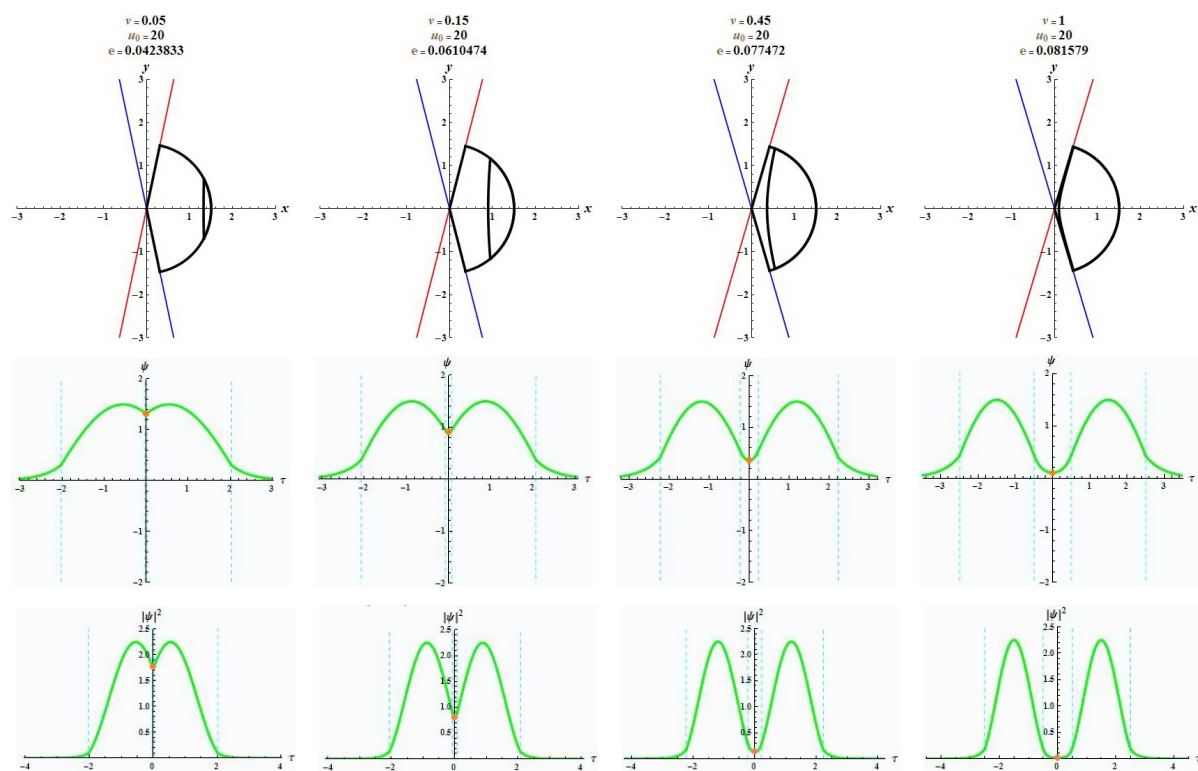
Oddľavovanie jám

Pozrime sa najprv, čo sa bude diať so základným stavom, keď budeme zvyšovať vzájomnú vzdialenosť jám. Na Obr. 3.6 je oranžovými guľôčkami znázornený pokles vlnovej funkcie v oblasti medzi jamami. Tento pokles vyplýva z tvaru trajektórie – môžeme si všimnúť, že os x pretíname pre hyperbolický pohyb v *III*. stále v menšej hodnote. Vidíme tiež, že pre základný stav sa energia so vzdľavovaním jám zvyšuje. Tento efekt sa dá jednoducho vysvetliť. Čím je vyššia energia, tým vyššia bude uhlová rýchlosť rotačného pohybu. To znamená, že pre stály čas $\tau = 2$ sekúnd sa častica dostane na (prvej) kružnici ďalej a prechádzať bude na hyperbolu, ktorá je k počiatku stále bližšie.

Všimnime si teraz vlnové funkcie. Keď sú jamy veľmi blízko seba, ich vlnová funkcia začína pripomínať vlnovú funkciu základného stavu jednej jamy (prvá časť Obr.3.6). To preto, lebo „k susedom nie je ďaleko“ a reálna častica takmer necíti stenu medzi jamami. Naopak, keď su jamy od seba dostatočne vzdialené, vlnová funkcia vyzerá ako dva základné stavy jednej jamy vedľa seba. Jamy spolu vôbec „nekomunikujú“ (posledná časť Obr.3.6), vlnová funkcia medzi nimi je takmer všade nulová.



Obr. 3.5: Dve jamy základ: Prvé štyri viazané stavy



Obr. 3.6: Dve jamy základ: Porovnanie základného stavu pri vzdalovaní jám

Závislosť celkovej energie od vzdialenosti jám

Pre základný stav teda platí, že čím viac od seba jamy vzdialíme, tým vyššia bude jeho energia. Čo sa stane s vyššími viazanými stavmi? Pozrime sa na Obr. 3.7. Sú na ňom prvé štyri viazané stavy pre „obrovskú“ vzdialenosť³ medzi jamami. Porovnajme teraz ich energie s energiami stavov na Obr. 3.5. Vidíme, že energia sa postupne pre prvý až štvrtý stav: zvýšila, znížila, zvýšila a znovu znížila. Tiež by sme si mohli všimnúť, že energie prvej/druhej dvojice stavov sú veľmi blízke.

Okrem energií môžeme porovnávať aj samotný tvar trajektórií a vlnových funkcií. Vidíme, že stavy na Obr. 3.7 vznikli zo stavov na Obr. 3.5 postupným predlžovaním hyperbolickej časti trajektórie za pohyb v *III*. a jej pritláčaním k asymptotám hyperbol (v rastie a po hyperbole ideme $\tau = v$ sekúnd). Dôležitejšie je však, ako *presne* hyperbolické časti vyzerajú.

Porovnajme prvú dvojicu stavov. Pre základný stav sa častica po prvom krúžení dostane *tesne pred* modrú asymptotu. To spôsobí, že nasadne na hyperbolu, po ktorej odpláva smerom vpravo hore, potom znova nasadne na rovnakú kružnicu⁴ a pri modrej asymptote zamieri do počiatku. O máličko väčšia energia druhého viazaného stavu spôsobí, že častica na hyperbolu prejde *tesne za* modrou asymptotou. Potom však odpláva smerom vľavo dole a na druhú kružnicu prejde na opačnej strane. Stačí teda maličký (energetický) „kopanček“ a trajektória sa zmení. Nezmení sa však hocijako. Vidno, že keby sme preklopili druhú časť trajektórie druhého stavu okolo osi y , dostali by sme prvý stav⁵. To lepšie vidno na obrázkoch vlnových funkcií (stredný rad Obr. 3.7.)

Čo sa však dá povedať o vlnovej funkcii v týchto stavoch? Vidíme, že sa líšia (iba) paritou. Keď sa zadívame na posledný rad Obr. 3.7, vidíme, že hustoty pravdepodobnosti pre prvý a druhý stav sú *totožné*. Rozhodne medzi nimi voľným okom neuvidíme taký veľký rozdiel ako medzi analogickou dvojicou na Obr. 3.5. Keď sa potom zadívame na druhú dvojicu viazaných stavov na Obr. 3.7, vidíme, že výsledky môžeme interpretovať úplne rovnakým spôsobom.

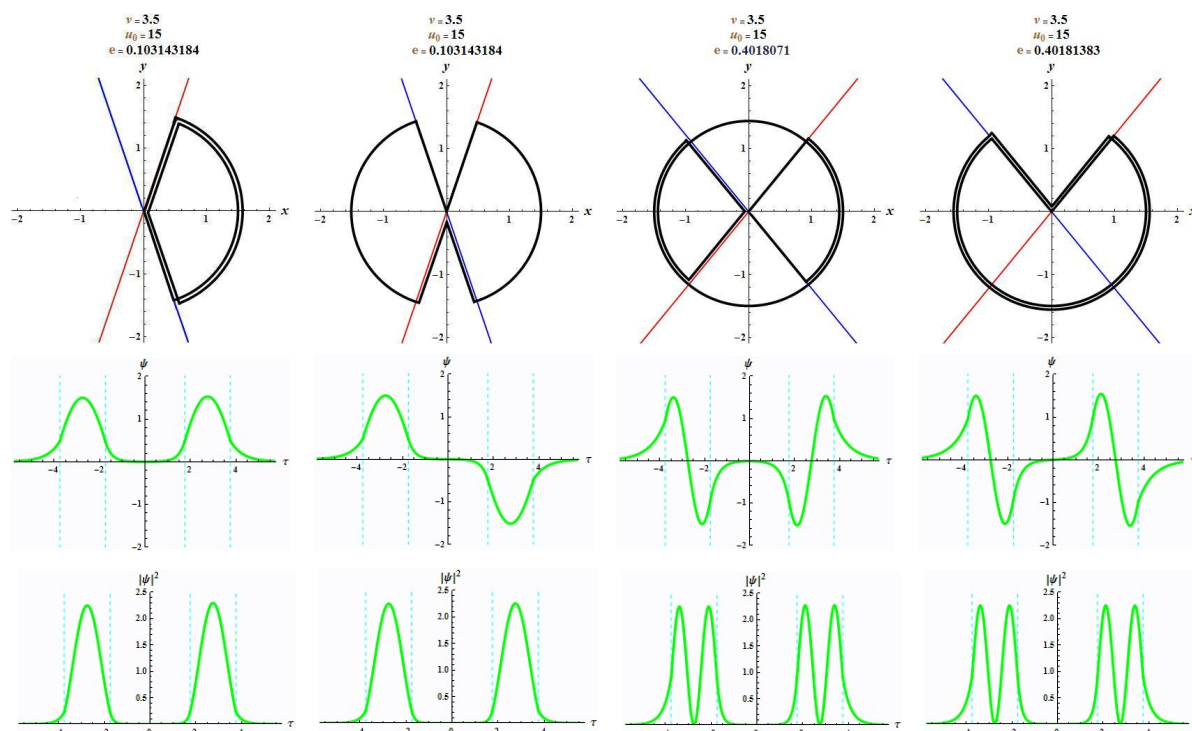
Obr. 3.6 vznikol postupným zväčšovaním šírky oblasti *III*. od hodnoty $v = 0.05$ až po hodnotu $v = 1$. Keby sme toto zopakovali pre všetky štyri viazané stavy v najväčšom možnom rozsahu a zaznamenali si všetky energie viazaných stavov, získali by sme graf ako na Obr. 3.8. Na grafe pekne vidno všetko, čo sme doteraz opisovali slovné. A teda

- *hladiny energií sa po dvojiciach zlievajú*
- *opakuje sa rastúca a klesajúca závislosť*

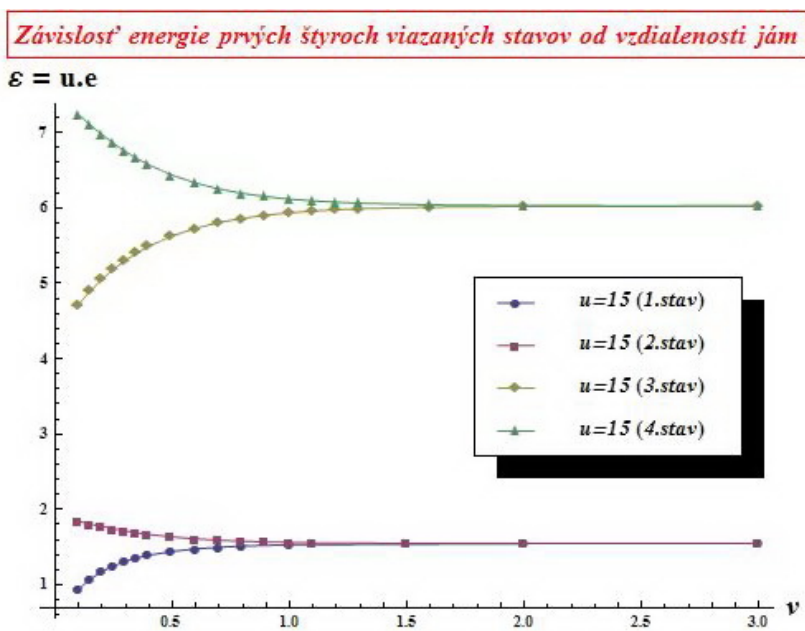
³Bolo by to vidieť aj pre menšiu vzdialenosť, presne tento obrázok však budeme potrebovať o chvíľu na niečo iné.

⁴Treba poznamenať, že obrázky sú mierne upravené, aby sa zvýraznil efekt, ktorý sa snažíme opísať. Stále platí, že trajektórie by mali byť osovo symetrické. Bez úpravy by sme však medzi hyperbolickými pohybmi pre prvý a druhý stav nevideli vôbec žiadny rozdiel.

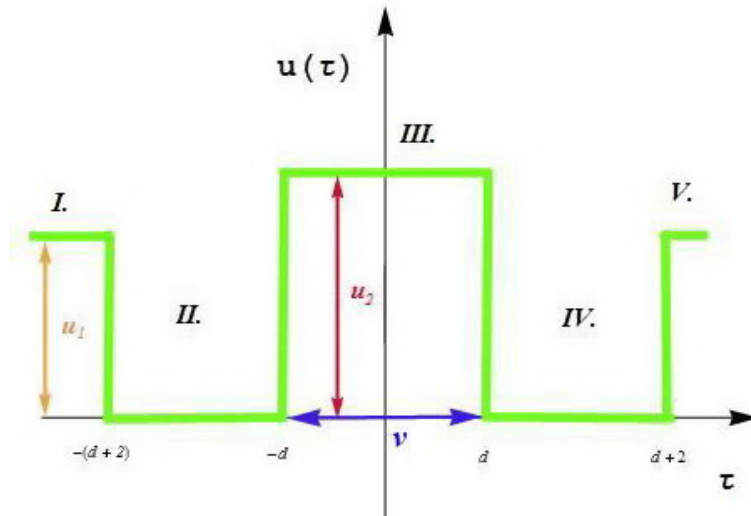
⁵Z predošlej poznámky o cielenej úprave trajektórií je jasné, že stav *je* ten istý



Obr. 3.7: Dve jamy základ: Prvé štyri viazané stavy pre jamy veľmi ďaleko od seba



Obr. 3.8: Dve jamy základ: Striedanie rastúcej a klesajúcej závislosti pre $\mathcal{E}(v)$



Obr. 3.9: Dve jamy bariéra stred: Potenciál

3.2.2 Bariéra v strede

Viazané stavy

Skúmame potenciál ako na Obr. 3.9. Znova sa jedná o symetrickú situáciu, a teda očakávame, že aj obrázky z fázového priestoru budú symetrické. Čo o nich vieme povedať všeobecne?

Oproti najjednoduchšiemu prípadu dvoch jám sa nám zmenil potenciál v oblasti *III.*. Tejto oblasti bude prislúchať hyperbolický pohyb s inou (väčšou) uhlovou rýchlosťou. Pri škálovaní znova chceme zachovať tvar kružníc (teda pre oblasti vnútra jám *II.* a *IV.*). Z toho vyplýva sklopenie asymptot hyperbol v oblastiach prislúchajúcim vonkajšku jám. Pre oblasť *III.* sú to však *iné* asymptoty, ako pre oblasti *I.* a *V.*. Keď si celkovú energiu označíme podľa vnútra jám ako $u_1 e \equiv \mathcal{E}$, pre kinetické energie potom platí

$$\text{pre oblasti II. a IV.: } k = \mathcal{E} = u_1 e \quad (3.3)$$

$$\text{pre oblasti I. a V.: } k = \mathcal{E} - u_1 = u_1 e - u_1 = u_1 (e - 1) \quad (3.4)$$

$$\text{pre oblasť III.: } k = \mathcal{E} - u_2 = u_1 e - u_2 = u_2 \left(\frac{u_1}{u_2} e - 1 \right). \quad (3.5)$$

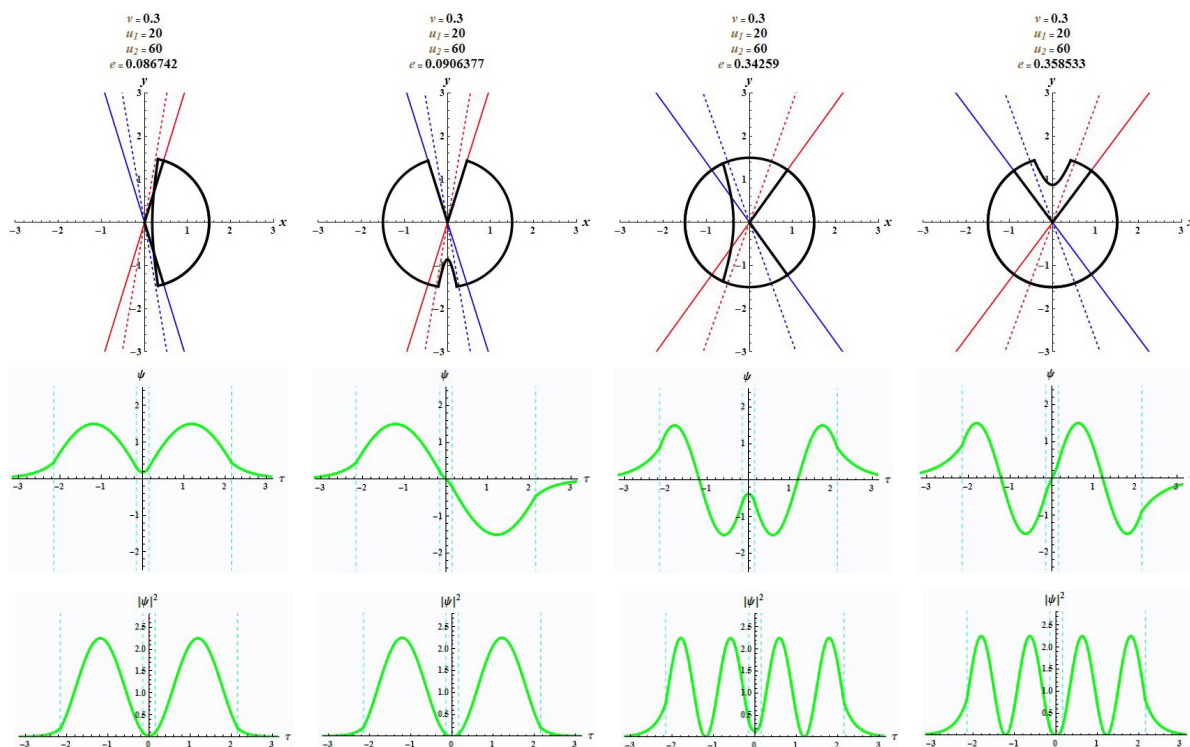
Pre uhlové rýchlosti jednotlivých oblastí zo vzťahov (3.3), (3.4) a (3.5) dostávame

$$\omega_{II,IV} = \sqrt{u_1 e} \quad \omega_{I,V} = \sqrt{u_1 (1 - e)} \quad \omega_{III} = \sqrt{u_2 \left(1 - \frac{u_1}{u_2} e \right)}. \quad (3.6)$$

Na základe rovnice (2.11) potom pre rovnice asymptot dostávame pre oblasti

$$\text{I. a V.: } y = \pm \frac{\omega_{I,V}}{\omega_{II,IV}} x = \pm \sqrt{\frac{1 - e}{e}} x \quad (3.7)$$

$$\text{III.: } y = \pm \frac{\omega_{III}}{\omega_{II,IV}} x = \pm \sqrt{\frac{u_2 (1 - \frac{u_1}{u_2} e)}{u_1 e}} x. \quad (3.8)$$



Obr. 3.10: Dve jamy bariéra stred: Prvé štyri viazané stavy

Vidíme teda, že pre oblasť *III.* máme „nový pár“ asymptot. Tieto asymptoty budeme na obrázkoch značiť ako čiarkované. Ako vyzerajú prvé štyri viazané stavy si môžeme pozrieť na Obr. 3.10.

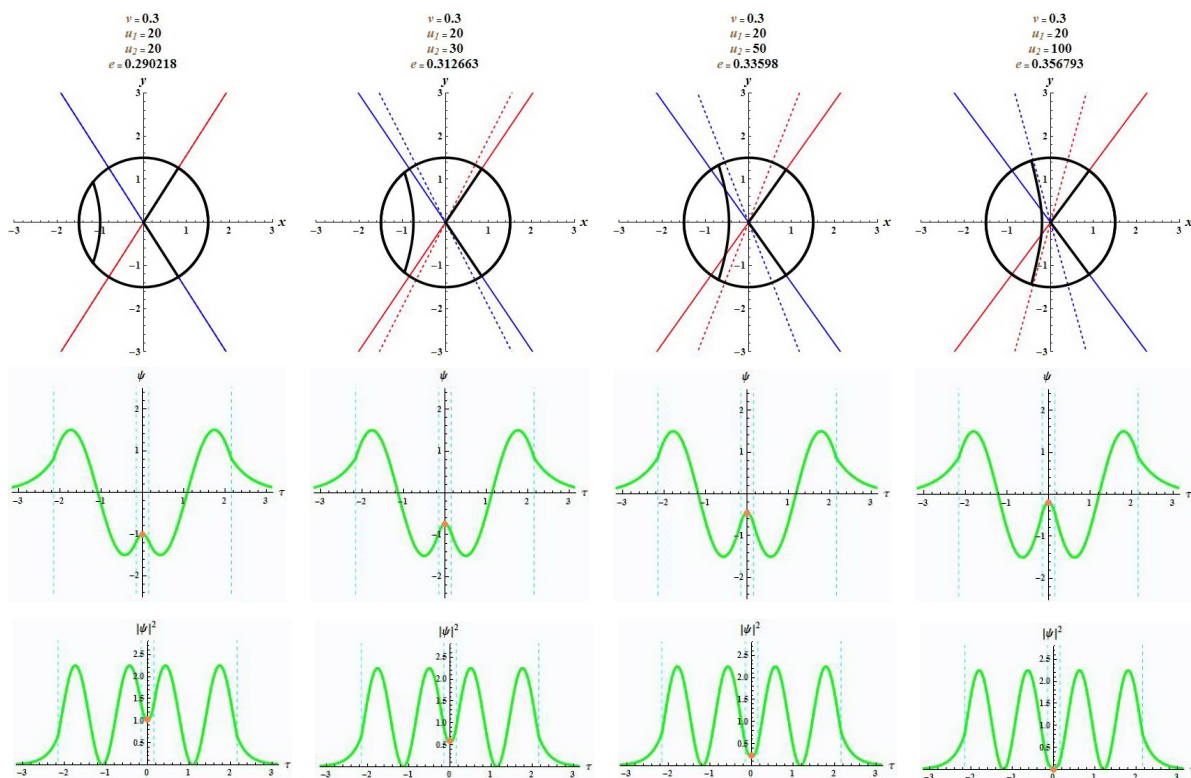
Zvyšovanie bariéry

Preskúmajme teraz, čo sa bude diať, keď bariéru budeme postupne zvyšovať z hodnoty rovnakej pre zvyšné oblasti nenulového potenciálu až po hodnotu veľmi vysokú. Porovnajme tvar trajektórií a vlnových funkcií napríklad pre tretí viazaný stav.

Ako si môžeme všimnúť na Obr. 3.11, pre trajektórie platí, že čím vyššia je bariéra, tým má viazaný stav vyššiu energiu. Ako sa to dá vysvetliť?

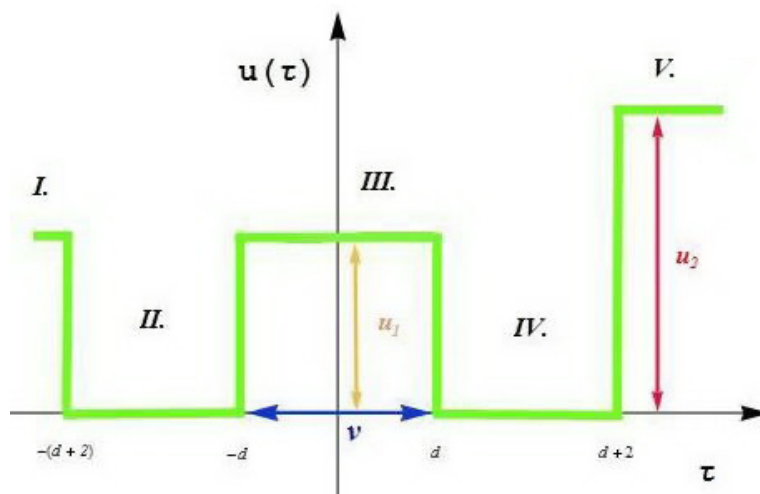
Z rovnice (3.8) vyplýva, že uhol asymptot pre oblasť *III.* (čiarkovaných) je vždy väčší ako uhol pre zvyšné oblasti *I.* a *III.*, lebo máme *bariéru* a teda $u_2 > u_1$. Tiež vieme, pri zvyšovaní bariéry, pôjdu čiarkované asymptoty k osi *y*, a ak sa pri tom bude meniť aj energia, nečiarkované pôjdu k osi *x*. Pre ten istý viazaný stav sa sklon pôvodných asymptot zmení minimálne, ale čiarkované budú stále bližšie k osi *y*. Keďže sa častica v oblasti *III.* pohybuje podľa hyperbol sklopených podľa čiarkovaných asymptot, bude v tejto oblasti prekonávať stále dlhšiu a dlhšiu dráhu. Jej rýchlosť totiž rastie (pomer potenciálov $\frac{u_2}{u_1}$ rýchlejšie ako klesá zlomok $\frac{1}{e}$ a čas ostáva rovnaký ($\tau = v$ sekúnd). Čiže očakávame, že častica sa bude stále viac a viac tlačiť k asymptotám. A presne to sa aj deje.

Na vlnových funkciách si môžeme všimnúť, že sa podľa očakávaní mení iba ich časť okolo počiatku, zodpovedajúca bariére. Oranžové guľôčky nám ukazujú, ako sa postupne zvyšuje



Obr. 3.11: Dve jamy bariéra stred: Porovnanie druhého excitovaného stavu pri zvyšovaní bariéry

šuje druhé lokálne maximum vlnovej funkcie, čo presne zodpovedá tomu, že častica naskakuje na hyperbolický pohyb v bariére stále neskôr, pričom začína na skoro tom istom mieste. Z tvaru hustoty pravdepodobnosti potom vyplýva, že častica má stále menšiu pravdepodobnosť tunelovania cez bariéru, ak sa bariéra zvyšuje – čo by sme asi tušili.



Obr. 3.12: Dve jamy bariéra vpravo: Potenciál

3.2.3 Bariéra vpravo

Viazané stavy

Zaujímajme sa teraz o nesymetrický problém, ktorého potenciál máme na Obr. 3.12. Poučení z časti 3.2.2 vieme, že tentokrát druhú sadu asymptot získajú hyperboly pre oblasť V . Častica sa bude do počiatku vracat' po modrej prerušovanej asymptote, o čom sa môžeme presvedčiť aj z Obr. 3.13, na ktorom máme prvé štyri viazané stavy.

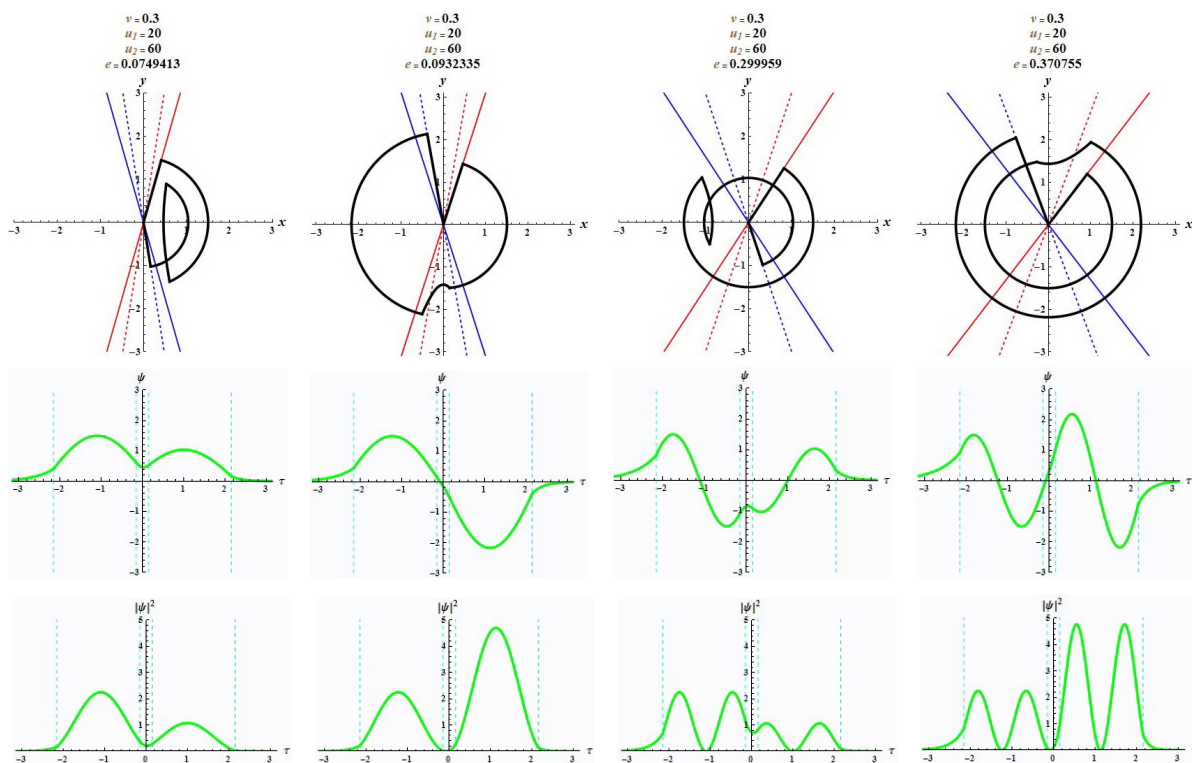
Zvyšovanie bariéry

Podme sa aj teraz pozrieť, ako nám zvyšovanie bariéry ovplyvní tvar obrázkov. Prvá časť Obr. 3.14 znova predstavuje štartovací bod – symetrický problém bez bariéry.

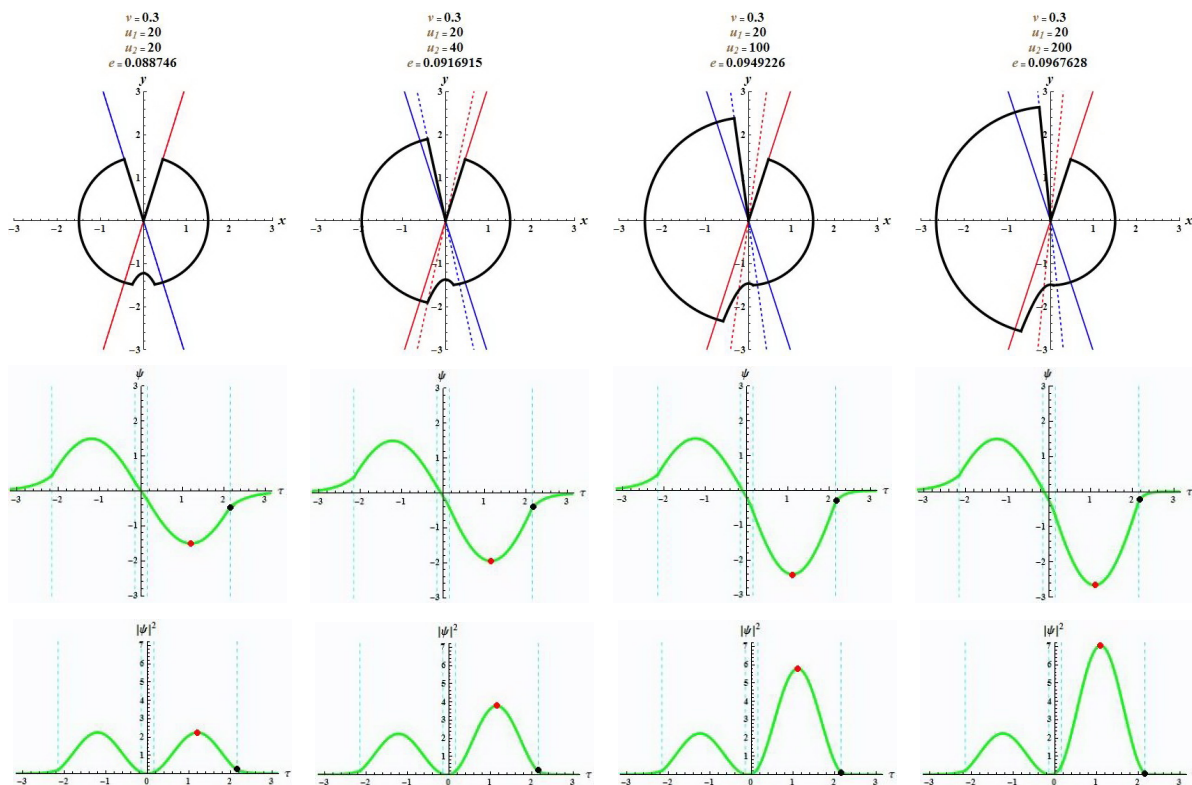
Pre uhly asymptot platí v princípe to isté, ako sme zistili v podčasti (3.2.2). Anomálny potenciál je len inde umiestnený. Teda pri minimálnej zmene sklonu nečiarkovaných asymptot sa sklon čiarkovaných znižuje. (Pri zvyšujúcej sa bariére sa teda čiarkované posúvajú stále bližšie k osi y .)

Ak potom chceme zistiť, ako sa zmení (napr. druhý) viazaný stav pri zvyšovaní bariéry uvažujeme nasledovne. Zo posledného vzťahu v (3.6) vidíme, že so zvyšujúcou sa výškou bariéry u_2 a nemennou výškou ostatných oblastí u_1 nám „uhlová rýchlosť“ hyperbolického pohybu v oblasti s bariérou rastie. (Pre bariéru je u_2 vždy väčšie ako u_1 .) To znamená, že častica v tejto oblasti vždy prejde dlhšiu vzdialenosť. Potom teda stále skáče na väčšiu kružnicu a obrázky sa zväčšujú. Z tohoto tiež vyplýva, že energia viazaného stavu bude so zvyšovaním bariéry rásť.

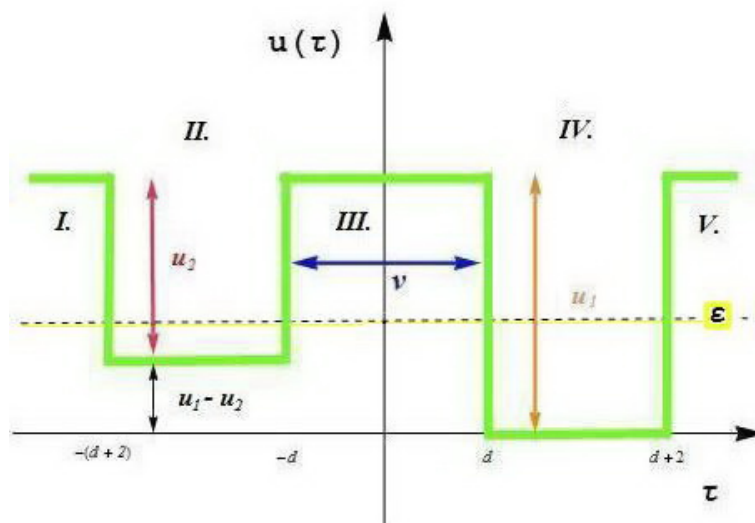
Na Obr. 3.14 si môžeme všimnúť nasledovné veci: pre ľavú jamu sa vlnová funkcia nemení, pre pravú klesá (červená guľôčka) a pre oblasť bariéry stúpa (čierna guľôčka). Preto pravdepodobnosť nájsť časticu v pravej jame pri zvyšovaní bariéry rastie a pravdepodobnosť výskytu v oblasti V klesá.



Obr. 3.13: Dve jamy bariéra vpravo: Prvé štyri viazané stavy



Obr. 3.14: Dve jamy bariéra vpravo: Porovnanie prvého excitovaného stavu pri zvyšovaní bariéry



Obr. 3.15: Dve jamy inej hĺbky: Potenciál

3.2.4 Iná hĺbka

Viazané stavy

V podčastiach (3.2.2) a (3.2.3) sme preskúmali viazané stavy pre dva rôzne potenciály s bariérami. Naučili sme sa, že v oblasti bariéry sa častica hýbe po hyperbolách, ktorých asymptoty sú sklopené inak ako asymptoty pre zvyšné oblasti nenulového potenciálu.

Čo sa však stane, ak zmeníme hĺbku niektorej z jám a vytvoríme potenciál napr. ako na Obr. 3.15? Ak budeme považovať oblasť IV. za referenčnú, tak znova máme $\mathcal{E} \equiv eu_1$. Potom sa ukazuje, že musíme rozlišovať *dva prípady*. Ak si totiž všimneme čiaru celkovej energie (ktorá je rovnaká vo všetkých oblastiach!), zisťujeme jednoduchú podmienku

- ak je \mathcal{E} menšia ako rozdiel hĺbok jám $u_1 - u_2$, jedná sa o *hyperbolický* pohyb,
- ak je \mathcal{E} prevyšuje $u_1 - u_2$, ide o *rotačný* pohyb,

ktorú môžeme prehľadnejšie napísať ako

$$e \begin{cases} < 1 - \frac{u_2}{u_1} & \text{pre } \mathcal{E} \in (0, u_1 - u_2), \\ \geq 1 - \frac{u_2}{u_1} & \text{pre } \mathcal{E} \in \langle u_1 - u_2, u_1 \rangle. \end{cases} \quad (3.9)$$

Pre kinetické energie v jednotlivých oblastiach potom platí

$$\text{IV.: } k = \mathcal{E} = u_1 e \quad (3.10)$$

$$\text{I., III. a V.: } k = \mathcal{E} - u_1 = u_1(e - 1) \quad (3.11)$$

$$\text{II. hyperbolická: } k = \mathcal{E} - (u_1 - u_2) = u_1(e - 1) + u_2 \quad (3.12)$$

$$\text{II. rotačná: } k = \mathcal{E} - (u_1 - u_2) = u_1(e - 1) + u_2. \quad (3.13)$$

Pre uhlové rýchlosti v jednotlivých oblastiach teda dostávame

$$\omega_{IV} = \sqrt{u_1 e} \quad (3.14)$$

$$\omega_{I,III,V} = \sqrt{u_1(1-e)} \quad (3.15)$$

$$\omega_{IIh} = \sqrt{u_1(1-e) - u_2} \quad (3.16)$$

$$\omega_{IIr} = \sqrt{u_1(e-1) + u_2} \quad (3.17)$$

Na základe podčasti (2.1.2) vieme, že každá oblasť anomálneho potenciálu má svoje preškáľovanie. Ak je takou oblasťou vonkajšok jamy, tak pre hyperbolický pohyb získavame nový pár asymptot. O tom sme sa dozvedeli dosť v podčastiach (3.2.2) a (3.2.3). Ak ale takouto oblasťou bude *vnútro* jamy (teraz *II.*), tak vzťahov (3.16) a (3.17) nielenže získame nový pár asymptot (ak $e < 1 - \frac{u_2}{u_1}$ a pohyb bude hyperbolický),

$$y = \pm \frac{\omega_{IIh}}{\omega_{IV}} x = \pm \sqrt{\frac{u_1(1-e) - u_2}{u_1 e}} x, \quad (3.18)$$

ale budeme mať aj zmenu pre rotačný pohyb, keď $e \geq 1 - \frac{u_2}{u_1}$. Škálujeme totiž vzhľadom na oblasť *IV.*, čiže pre rotačný pohyb v *II.* môžeme dostať už len *elipsy*. Potom podľa (2.5) dostaneme

$$\begin{pmatrix} x(\tau) \\ y(\tau) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\omega_{IIr}\tau) & \frac{\omega_{IV}}{\omega_{IIr}} \sin(\omega_{IIr}\tau) \\ -\frac{\omega_{IIr}}{\omega_{IV}} \sin(\omega_{IIr}\tau) & \cos(\omega_{IIr}\tau) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix}. \quad (3.19)$$

Znova sa pýtame, čo môžeme očakávať od obrázkov viazaných stavov.

Zoberme si najprv prípad, keď ešte celková energia nie je dosť vysoká a častica sa pohybuje v oblasti prislúchajúcej *II.* po hyperbole uhlovou rýchlosťou ω_{IIh} . Vtedy vlastne častica ide po hyperbole dvakrát po sebe! Stále však platí, že ak sa krúžením (teraz len v oblasti *IV.*) dostane na modrú nečiarkovanú asymptotu, čaká ju šťastná cesta domov – do počiatku. Ako sa ukazuje na prvých dvoch častiach Obr. 3.16, dva hyperbolické pohyby odniesli časticu poriadne ďaleko – obrázky sú na gigantických škálach, oproti tomu, na čo sme normálne zvyknutí⁶. Preto aj dobre nevidno prvú časť pohybu – kúsok po červenej nečiarkovanej asymptote.

Na vlnovej funkcii prvého viazaného stavu, si môžeme všimnúť, že reálna častica takmer ani len netuší, že existuje niečo ako druhá jama a silno preferuje pobyt v hlbšej jame, čo sa hneď v druhom viazanom stave zmení (a vyrovná).

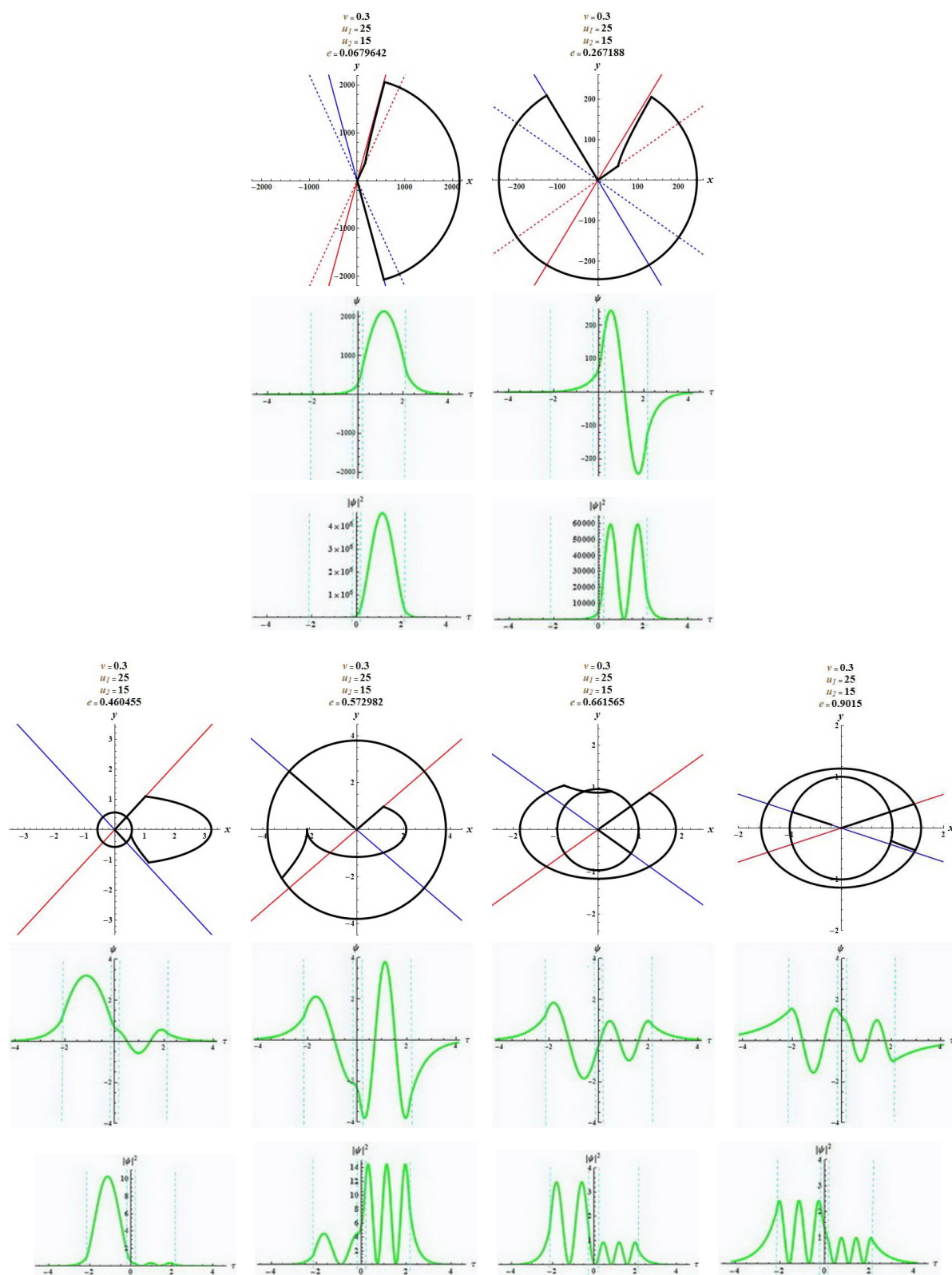
Keď energia presiahne hodnotu, ktorú určuje vzťah (3.9), čiže v našom prípade⁷ $e = 0.4$, bude častica v oblasti *II.* „krúžiť“ po elipse⁸. Na ďalších štyroch častiach Obr. 3.16 sú ďalšie štyri viazané stavy s rotačným pohybom v *II.* Môžeme si všimnúť, že v 3. excitovanom stave bude mať reálna častica veľmi veľkú pravdepodobnosť tunelovania v oblasti *V.* Týmto s dvomi jamami končíme⁹.

⁶Veď sa aj sakramentsky ťažko hľadali.

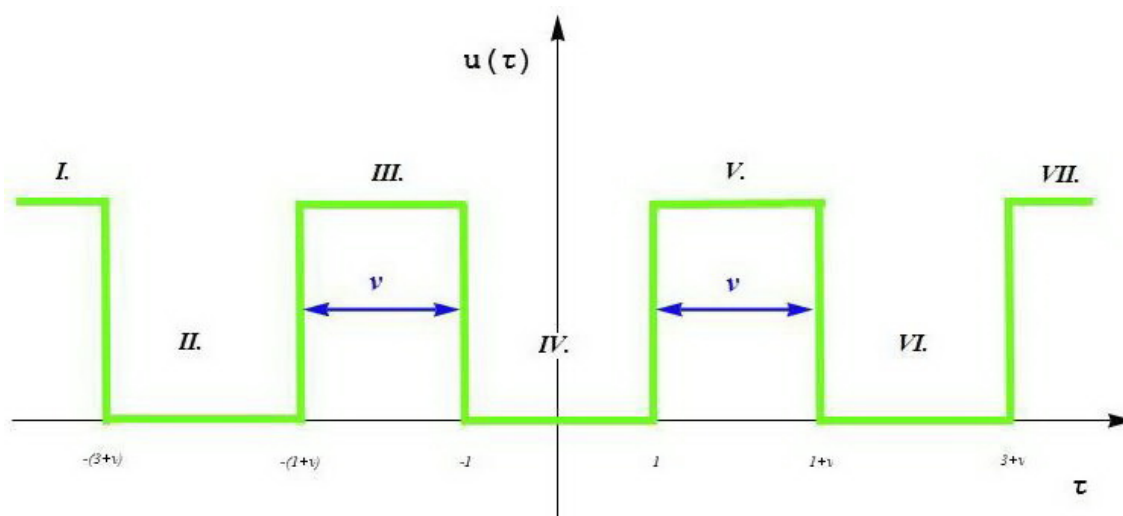
⁷Pre hodnoty potenciálov $u_1 = 25$ a $u_2 = 15$.

⁸Druhé asymptoty sa už v obrázkoch samozrejme kresliť nebudú!

⁹Mohli by sme skúmať efekt zmeny hĺbky prvej jamy. Principiálne to samozrejme možné je. Trajektórie sa však menia natoľko prudko, že analýza tohoto efektu úplne stráca zmysel.



Obr. 3.16: Dve jamy iná hĺbka: Prvých šesť viazaných stavov



Obr. 3.17: Tri jamy základ: Potenciál

3.3 Tri jamy

V podobnom duchu, ako sme preskúmali rôzne možnosti konfigurácie pre potenciály dvoch jám, teraz urobíme v zložitejšom prípade troch jám. Najprv sa zameriame na základný prípad, kde nájdeme prvých pár viazaných stavov. Znova nás bude zaujímať ako vzdialenosť jám ovplyvní viazané stavy a ich energie.

V druhej podčasti sa pozrieme na špeciálny symetrický prípad – prípad troch jám s *dvomi vnútornými symetrickými bariérami*.

3.3.1 Základná konfigurácia

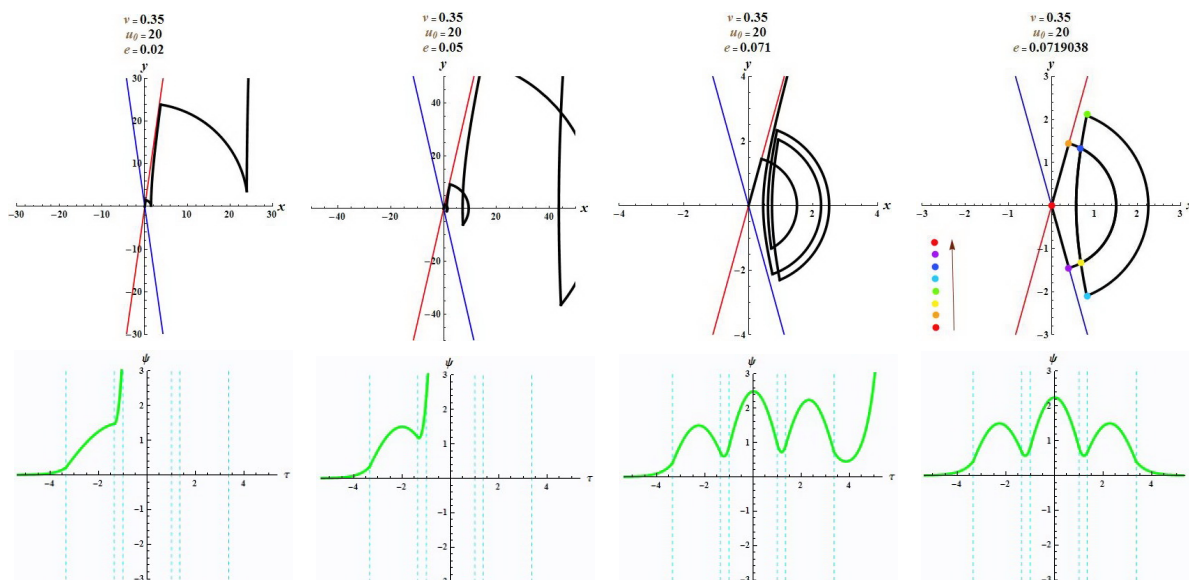
Viazané stavy

Zaoberajme sa na začiatok znova najjednoduchšou situáciou – troma identickými jamami rozmiestnenými symetricky tak, ako na Obr. 3.17. Získame tak cit pre tvary trajektórií viazaných stavov, ktorý využijeme v zložitejšom prípade.

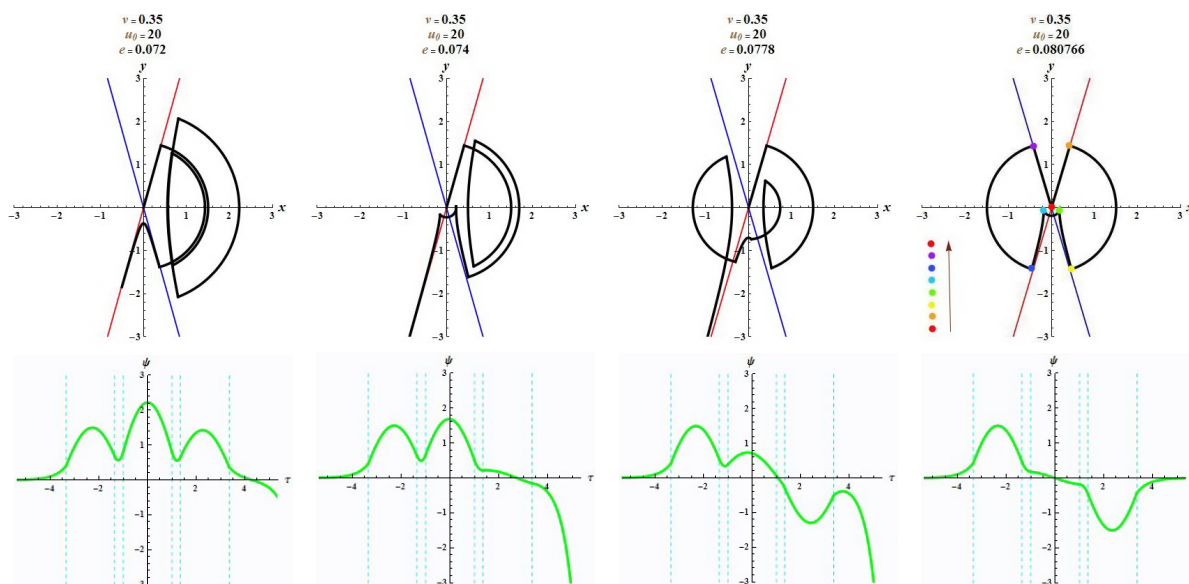
Z toho, čo sme sa už naučili, vieme, že trajektória fiktívnej častice sa teraz bude skladať zo siedmich častí, pričom „uhlové rýchlosti“ pre hyperbolický pohyb v oblastiach $I.$, $III.$, $V.$ a $VII.$ budú rovnaké, len v oblastiach $III.$ a $V.$ sa častica zdrží iný čas ($\tau = v$ sekúnd). Rotačný pohyb pre všetky tri jamy (oblasti $II.$, $IV.$ a $VI.$) bude zase definovaný rotačnou uhlovou rýchlosťou a časom $\tau = 2$ sekundy.

Cestu k prvým dvom viazaným stavom môžeme vidieť na Obr. 3.18 a Obr. 3.19. Kvôli lepšej názornosti¹⁰ sú medzi jednotlivými časťami trajektórií pridané farebné guľôčky v poradí farieb spektra (červená, oranžová, žltá, zelená, svetlomodrá, tmavomodrá, fialová). Prvých šesť viazaných stavov, aj s hustotami pravdepodobnosti môžeme vidieť na Obr. 3.20.

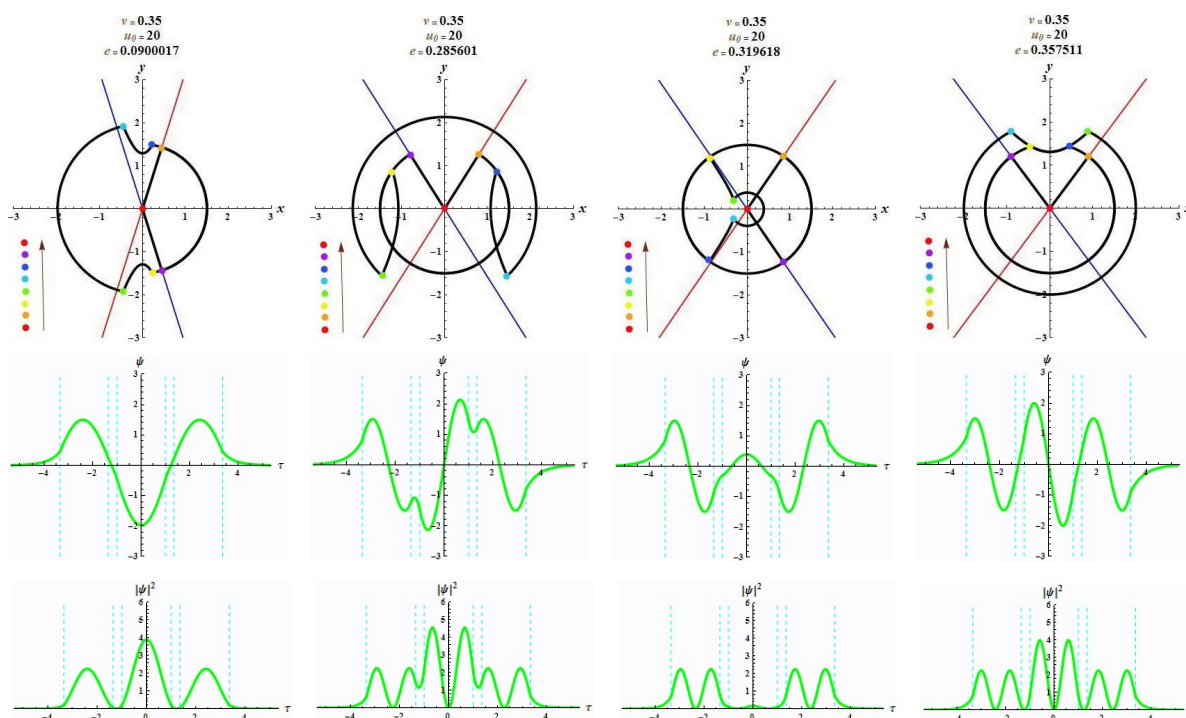
¹⁰Veľikaja polemika.



Obr. 3.18: Tri jamy základ: Cesta k základnému stavu



Obr. 3.19: Tri jamy základ: Cesta k prvému excitovanému stavu



Obr. 3.20: Tri jamy základ: Tretí až šiesty viazaný stav

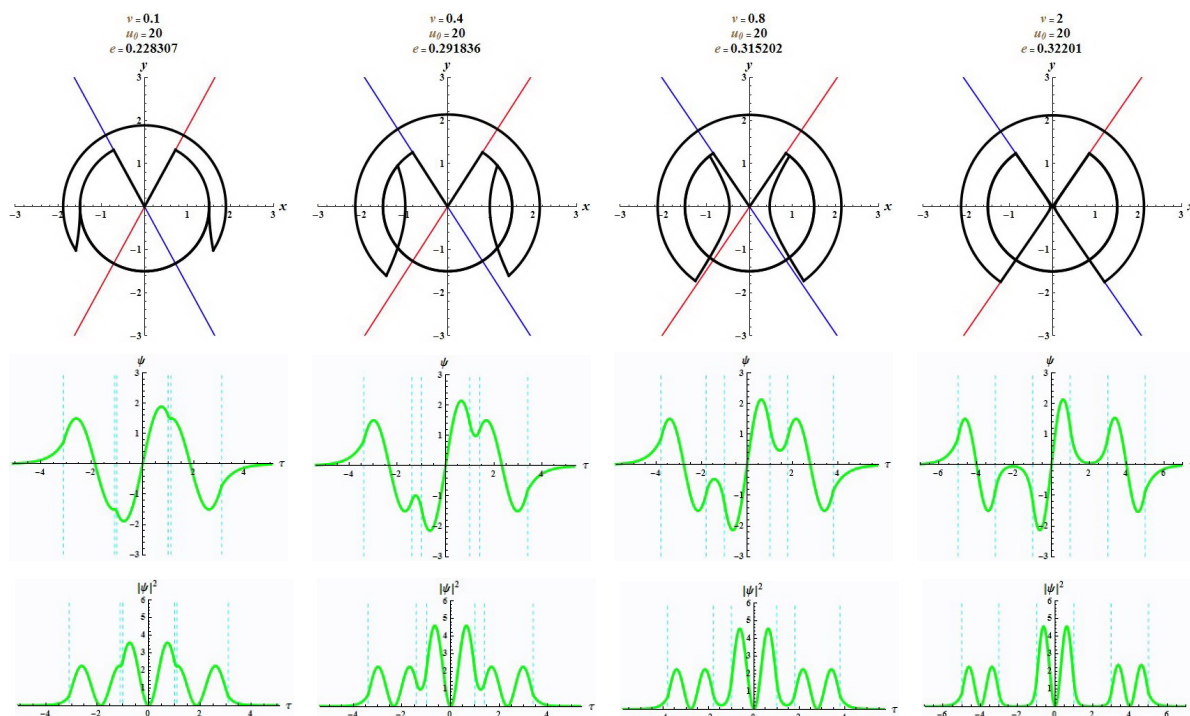
Obrázky viazaných stavov sú teraz už dosť zložité. Musíme dbať na správne poradie typov trajektórií, teraz máme: asymptota, kružnica, hyperbola, kružnica, hyperbola, kružnica, asymptota. Takisto polovice dráh musia byť navzájom zrkadlovo symetrické, lebo máme symetrický potenciál. A nesmieme vynechať žiadnu časť trajektórie (princíp kreslenia obrázkov „jedným ťahom“)!

Problém môže nastať napríklad s počtom obehov pri piatom viazanom stave (tretia časť Obr. 3.20). Mohli by sme si myslieť, že na hyperbolu môžeme „odbočiť“ skôr. Keby sme odbočili hneď, ako je to možné (čiže teraz po oranžovej hneď na fialovú), dostali by sme sa rovno do počiatku, a bolo by po zábave. Skúsili by sme preto ďalšiu možnosť – odbočiť na tmavomodrej. To vyzerá celkom nádejne. Keby sme to však urobili, tak by sme nikdy neprešli oblasť medzi tmavomodrou a žltou! Takže využime poslednú možnosť, a to zabočiť až na (správnej) žltej. Až vtedy môžeme všetky časti trajektórie prejsť a nakresliť ju jedným ťahom.

Oddaľovanie jám

V podčasti (3.2) sme skúmali, ako sa s oddaľovaním *dvoch* jám zmenil základný stav. Teraz sa poďme pozrieť, čo sa stane (napr.) s tretím excitovaným stavom, keď budeme parameter v zväčšovať v oboch oblastiach *III.* a *V.* súčasne.

Výsledok môžeme vidieť na Obr. 3.21. Oranžové guľôčky nám znova zvyrazňujú miesta na obrázkoch, ktoré sa najprudšie menia. Vidíme, že pri veľmi malej vzájomnej vzdialenosti (prvá časť Obr. 3.21) nám vlnová funkcia už veľmi pripomína vlnovú funkciu pre tretí excitovaný stav *jednej* jamy – vzdialenosť medzi jamami sa stáva zanedbateľnou.



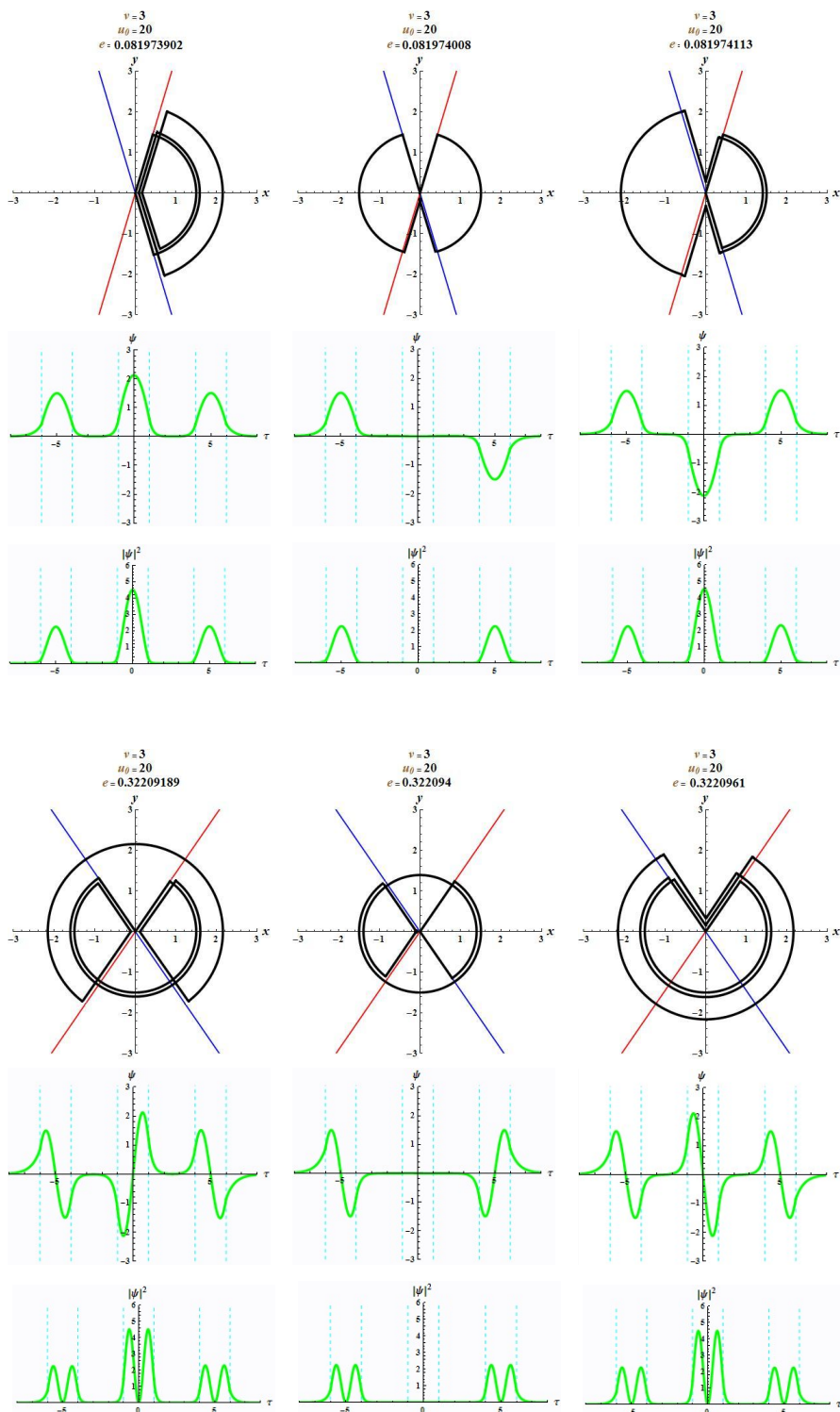
Obr. 3.21: Tri jamy základ: Porovnanie tretieho excitovaného stavu pri vzdďalovaní jam

Opačným extrémom ja zase posledná časť Obr. 3.21, kde vlnová funkcia skôr pripomína tri vlnové funkcie pre každú jamu zvlášť – pravdepodobnosť tunelovania klesá. Pri takejto veľkej vzdialenosti (rovnaká ako šírka samotných jam) sa už jamy takmer neovplyvňujú.

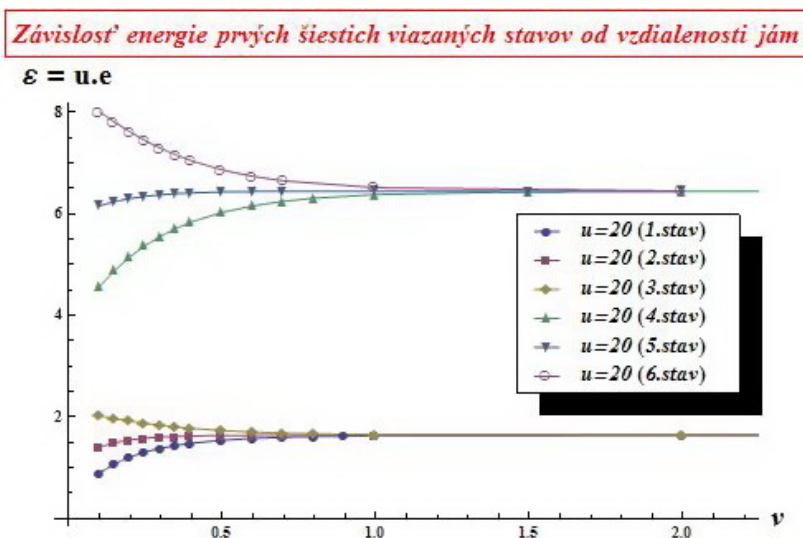
Závislosť celkovej energie od vzdialenosti jam

Zistili sme teda, že energia tretieho excitovaného stavu sa vzdialením jam *zvýšila*. Ako na tom budú ostatné viazané stavy? Ukazuje sa, že má zmysel skúmať aspoň prvých šesť stavov. Ak hodnoty na Obr. 3.22 porovnáme s hodnotami na poslednej časti Obr. 3.18 a Obr. 3.19 a celom Obr. 3.20, uvidíme, že energie sa nám zmenili v nasledujúcom poradí: zvýšenie, zvýšenie, zníženie, zvýšenie, zvýšenie a zníženie. Pri tom hodnoty energií sú teraz veľmi blízke pre *trojice* stavov. Ako si tento efekt môžeme vysvetliť?

Situácia je v zásade analogická problému s oddďalovaním dvoch jam. Vrásky nám však (právom) môžu spôsobovať stredné stavy z obidvoch trojíc. Ľudovo povedané, sú totiž dosť odveci. Podľa hustoty pravdepodobnosti sa rozhodne nejedná o stavy totožné s prvými/poslednými z trojíc. Vlnová funkcia nám pre strednú jamu úplne *zmizla*! To zodpovedá častiam trajektórií, ktoré na obrázkoch *nevidíme*. Keby sme sledovali vývoj takýchto „medzistavov“ pozorne od malej až po (túto) veľkú vzdialenosť jam, videli by sme, že kružnica za oblasť *IV*. by sa postupne zmenšovala na malinkú „kružničku“. Nakoniec by sa stala takou „mrňúskatou“ (doc. Ján Mózer ©) ako na Obr. 3.22, čiže pri tomto zväčšení neviditeľnou. Nesmieme však zabúdať, že všetky jamy sú rovnako široké, čiže častica prejde po všetkých troch kružniciach *ten istý uhol*.



Obr. 3.22: Tri jamy základ: Prvých šest' viazaných stavov pre jamy veľmi ďaleko od seba



Obr. 3.23: Tri jamy základ: Závislosť celkovej energie $\mathcal{E}(v)$

Objasniť medzistavy by mohol pomôcť Obr. 1.2 (obrázok hyperbolického poľa z prvej kapitoly). Všimnime si veľkosť šípok predstavujúcich vektorové pole. Tie sa nám smerom z okrajov do stredu *zmenšujú*. Môžeme teda predpokladať, že tesne pri asymptotách je tok skutočne *veľmi pomalý*. Pre naše medzistavy to potom celkom jednoducho znamená to isté, že „na bicykli sa za ten istý čas tak ďaleko ako vlakom proste nedostaneme“.

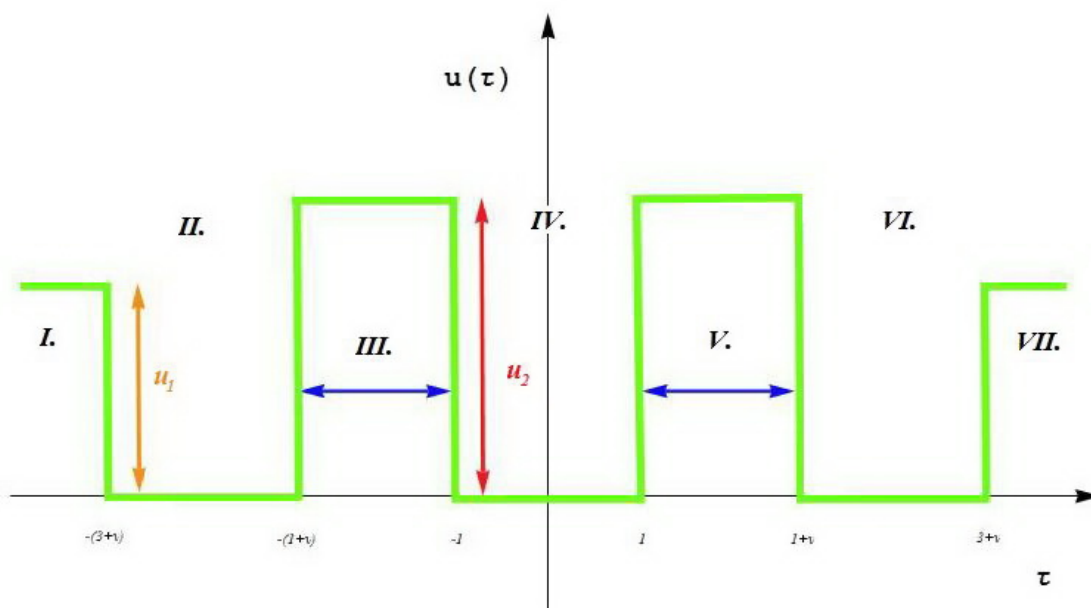
Vezmime si napr. prvú trojicu. Aj pre základný stav sa častica dostane veľmi blízko k modrej asymptote¹¹, zjavne však ešte nie do oblasti veľmi pomalého toku. Stredná kružnica je totiž väčšia ako krajné. Naproti tomu, pre druhý viazaný stav sa častica dostane tak blízko k asymptote¹², že za ten istý čas ($\tau = v$) prejde oproti základnému stavu akoby len polovicu dráhy. Kým v základnom stave prejde úplne zdola až úplne hore, pri druhom viazanom stave je to len zdola do stredu. A tam ju čaká miniatúrna kružnica, rotáciou po ktorej sa dostane znova tak blízko k červenej asymptote, že musí znova prejsť len „polovicu“ oproti základnému stavu. Zvyšok je jasný. Tretí stav sa už pred modrú asymptotu nenasúka a prvá rotácia časticu odnesie tesne za modrú asymptotu.

Druhá trojica stavov by sa dala analyzovať podobne. Otázku, že prečo je to práve takto a aký je fyzikálny význam medzistavov, zatiaľ nechávame otvorenú. Snáď ju bude možné zodpovedať po ďalšom štúdiu. Na záver¹³ pripájame Obr. 3.23, ktorý je „okolapným“ dôkazom skúmaných javov.

¹¹ Znova pripomínáme, že obrázky sú „sfušované“. Keby sme čiary troška nepoposúvali, nebolo by o čo oprieť diskusiu. Hodnoty energií nad obrázkami však zodpovedajú vlnovým funkciám.

¹² Bližšie už nedá, ďalší stav už je *za* asymptotou!

¹³ Za to, že graf sa v skutočnosti nachádza vo *vrchnej* časti strany patrí samozrejme vďaka L^AT_EX - u. Vždy je to však lepšie takto, ako keby sme ho našli niekde za humnami, napríklad stránku pred Literatúrou.



Obr. 3.24: Tri jamy vnútorné bariéry: Potenciál

3.3.2 Dve symetrické vnútorné bariéry

Viazané stavy

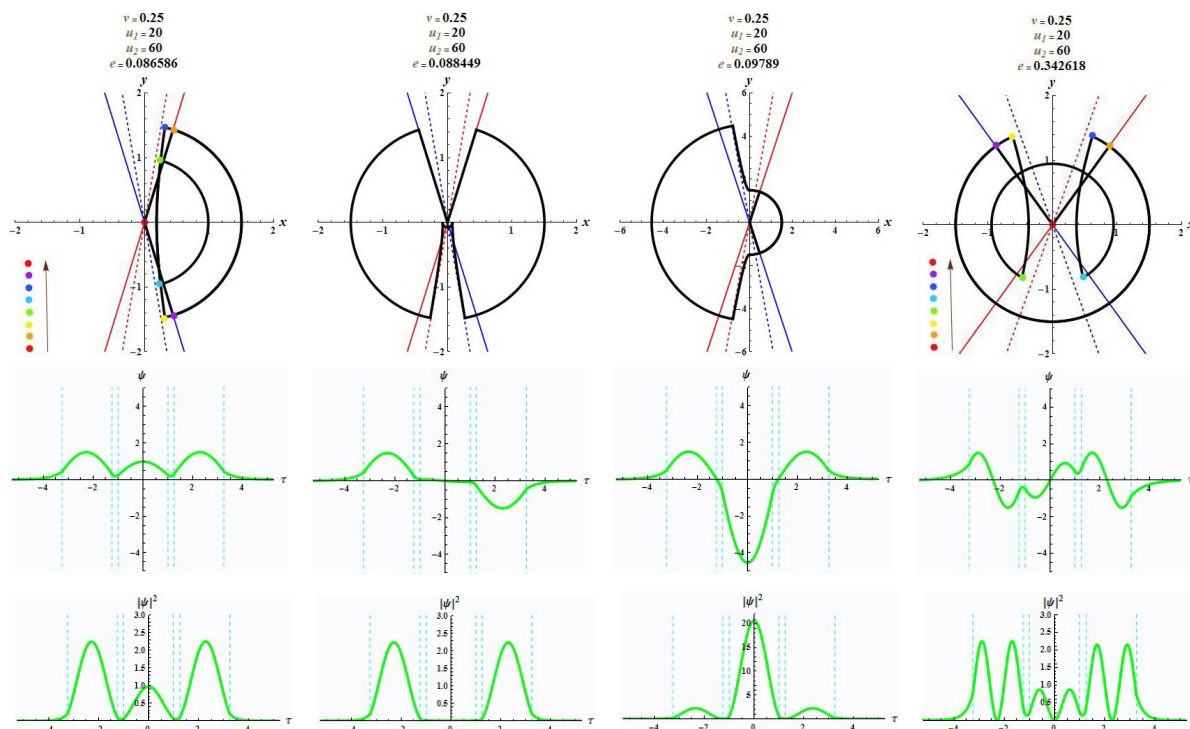
Náš potenciál vyzerá ako na Obr. 3.24. Analogicky podľa časti (3.2.2) vieme, že pre hyperbolický pohyb zodpovedajúci oblastiam bariér *III.* a *V.* sa častica bude pohybovať po hyperbolách podľa asymptot, ktorých sklon je daný pomerom hyperbolickej „uhlovej rýchlosti“ v oblastiach bariér a rotačnej uhlovej rýchlosti pre oblasti jám. Hyperbolický pohyb teda na obrázkoch spoznáme podľa čiarkovaných asymptot.

Jedná sa o symetrický problém, očakávame teda symetriu aj na obrázkoch fázo-vého priestoru a im zodpovedajúce symetrie vlnových funkcií. Prvé štyri viazané stavy sú na Obr. 3.25. Pre základný a tretí excitovaný stav sme znova pridali farebné guľôčky, aby sa trajektória dala ľahšie nahliadnuť.

Porovnanie oddľovania jám a zvyšovania bariér

Na Obr. 3.26 vidíme porovnanie pre postupné zvyšovanie bariéry s rozdielmi 0, 10, 20 a 50 *nad* potenciálom oblastí *I.* a *VII.*. V podčasti (3.2.2) sme zistili, že pri zvyšovaní bariéry nám klesla vlnová funkcia v oblasti bariéry. Teraz vidíme, že pri zvyšujúcich sa bariérach vlnová funkcia klesne pre oblasť jamy *medzi nimi*.

Ako to vysvetlíme len pomocou obrázkov? Vieme, že pre čiarkované asymptoty sa so zvyšujúcou sa bariérou posúvajú smerom k osi y a ich uhol je vždy väčší ako uhol nečiarkovaných. Predstavme si teraz, že máme energiu ako na prvej časti Obr. 3.26 a zdvihneme bariéru do výšky $u_2 = 30$, tak ako je to na druhej časti obrázku. Modrá asymptota, ku ktorej máme po prvom krúžení zamierené, sa nám posunula *ďalej*. Aby sme ju teda mohli dosiahnuť,



Obr. 3.25: Tri jamy vnútorné bariéry: Prvé štyri viazané stavy

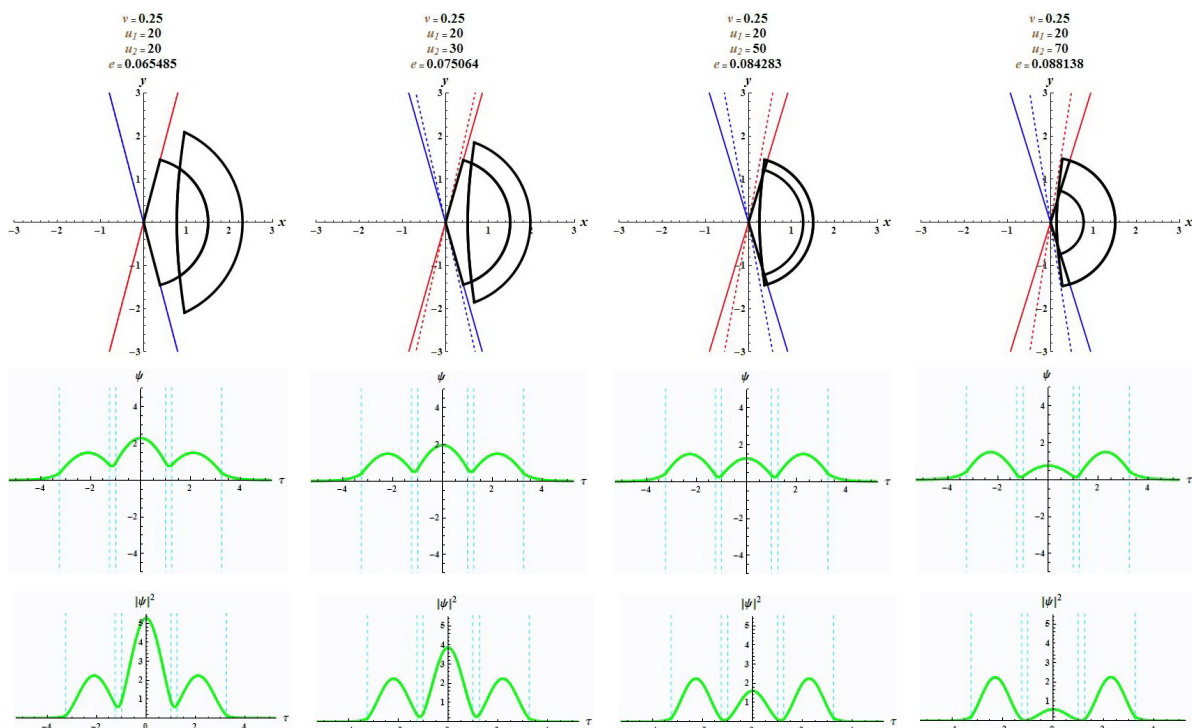
musíme *zvýšiť* energiu. Toto sa postupne deje na všetkých častiach Obr. 3.26. Čím sme však bližšie k asymptotám, tým nás tok unáša pomalšie a tým menšiu dráhu stihneme prejsť – obrázky sa zmenšujú.

Na Obr. 3.27 vidíme porovnanie pre postupné oddiaľovanie dvoch krajných jam pri fixnej výške bariéry. Obrázok nám znova ukazuje známy fakt, že oddiaľovanie vedie k tendencii „neinterakcie“ medzi jamami. Už pri hodnote $v = 0.7$ vlnová funkcia pripomína skôr skopírovaný základný stav pre každú jamu zvlášť. Keďže nám však strednú jamu „zakrývajú“ (celkom vysoké) bariéry, vlnová funkcia pre oblasť *IV*. výrazne poklesne.

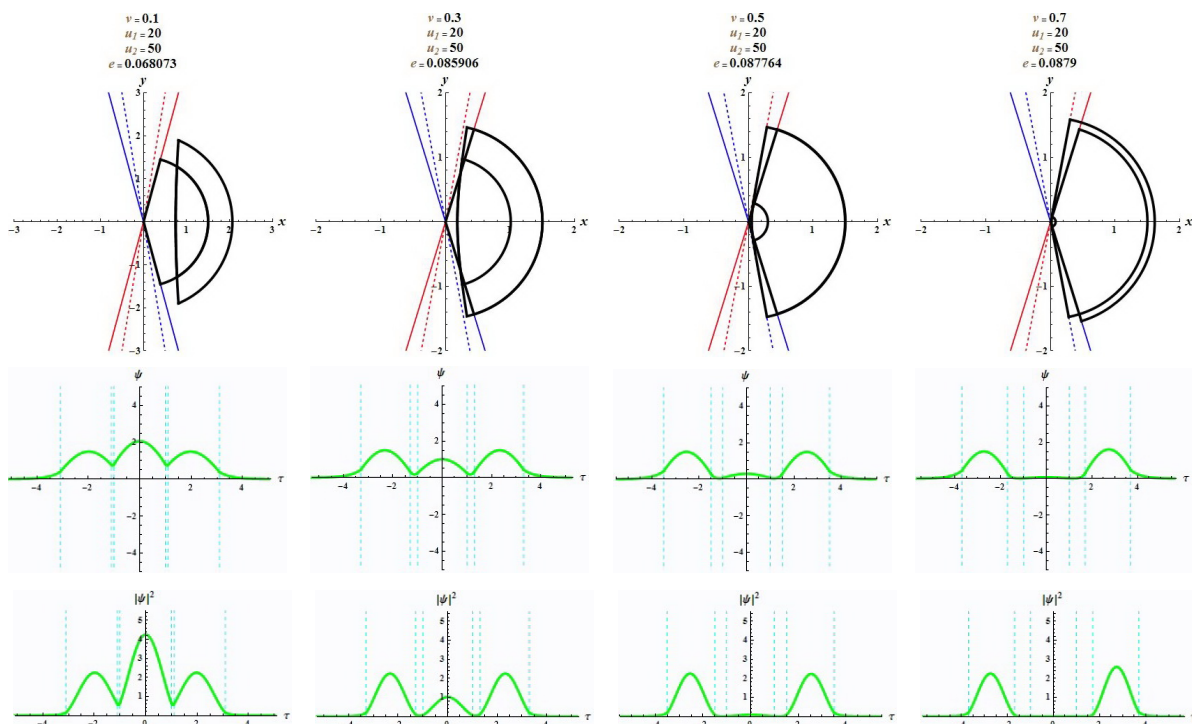
Ako si môžeme takýto pokles vlnovej funkcie vysvetliť len z trajektórií? Znova si predstavme situáciu, že jamy oddialíme a energiu necháme takú, aká bola predtým (napr. prechod medzi prvou a druhou časťou Obr. 3.27). Potom sa hyperbolickým pohybom dostaneme ďalej, ako predtým, pričom po kružniciach sa stále ide $\tau = 2$ sekundy. Energii teda musíme trochu zvýšiť, aby sme dostali viazaný stav. Toto málo ovplyvní sklon normálnych a ešte menej sklon čiarkovaných asymptot. Zvýši sa nám však rotačná uhlová rýchlosť. To znamená, že sa krúžením dostaneme vždy *bližšie* k čiarkovaným asymptotám. Od istej hodnoty energie, dosiahneme takú rýchlosť, že sa dostaneme až do oblasti veľmi pomalého hyperbolického toku. A to, ako vieme, spôsobí, že stredná rotácia sa bude diať po veľmi malej kružnici¹⁴ a príslušná časť vlnovej funkcie výrazne klesne.

Obidva efekty (zvyšovanie aj oddiaľovanie) nám spôsobujú pokles vlnovej funkcie, tu sú ich účinky vlastne znásobené.

¹⁴Teraz nám tento efekt trochu mierni to, že zväčšujeme vzdialenosť medzi jamami.



Obr. 3.26: Tri jamy vnútorne bariéry: Porovnanie základného stavu pri zvyšovaní bariéry



Obr. 3.27: Tri jamy vnútorne bariéry: Porovnanie základného stavu pri vzdalovaní jám

ZHRNUTIE Kapitoly 3

V tejto kapitole sme zovšeobecnilí výsledky z Kapitoly 2 na zložitejších prípadoch dvoch a troch jám.

Na začiatku sme sa krátko zmienili o nekonečnej jame, ako o zaujímavom limitnom prípade. Zistili sme, že asymptoty hyperbol sa pre ňu nebudú sklápať a častica bude obiehať len po kružniciach. Každý ďalší polkruh potom predstavoval ďalší viazaný stav.

Pri základnej konfigurácii dvoch jám nám oproti jednej jame pribudla stredná časť hyperbolickej trajektórie. Rovnako sme preskúmali, čo sa deje, keď jamy od seba vzdialíme. Našli sme graf závislosti energie viazaných stavov od vzdialenosti a zistili sme, že sa budú zlievať energie dvojíc viazaných stavov.

V podčasti (3.2.2) sme sa pozreli na symetrický prípad bariéry v strede. Pre túto oblasť nám pribudol nový pár asymptot hyperbol. Skúšali sme túto bariéru zvyšovať a overili sme si, že pravdepodobnosť výskytu reálnej častice v tejto oblasti klesne.

V podčasti (3.2.3) sme preskúmali asymetrický potenciál dvoch jám s bariérou vpravo. Znova sme získali nový pár asymptot a skúšali bariéru dvíhať a dívali sa, ako sa mení nejaký viazaný stav.

Posledným problémom s dvomi jamami, ktorým sme sa zaoberali, boli dve jamy s rôznou hĺbkou v podčasti (3.2.4). Zistili sme, že treba rozlišovať dva prípady: v prvom sa jednalo o hyperbolický pohyb v oblasti zodpovedajúcej plytšej jame a v druhom o rotačný. Táto podmienka závisela od energie. Pre prípad hyperbolického pohybu sme znova získali ďalšie asymptoty, pre prípad rotačného pohybu sa príslušná časť trajektórie zmenila z kružnice na elipsu.

Pre tri jamy sme tiež najprv skúmali základný potenciál. Znova sme jamy oddľovali a našli sme graf závislosti energie viazaných stavov od vzdialenosti jám. Tentokrát sa energie zlievali vždy pre trojice viazaných stavov.

Na záver sme preskúmali potenciál troch jám s dvomi vnútornými bariérami. Zaujímali nás jednak efekt vzdľavovania jám a jednak efekt zvyšovania bariér.

Záver

Zopakujme si teda, čo sme sa v tejto práci naučili. Naším cieľom bolo nájsť viazané stavy a príslušné energie pre problémy s rôznymi *pravouhlými potenciálovými jamami*.

V prvej kapitole sme si prepísali *Schrödingerovu rovnicu* na systém dvoch rovníc prvého rádu. Pri uvážení toho, že sa zaoberáme len jednorozmernými a po častiach konštantnými potenciálmi, sme jednoduchým výpočtom získali dva typy riešení. Tie predstavovali *rotáciu* a *hyperbolickú rotáciu* v rovine *fázového priestoru*. Rotácie súviseli s oblasťou vnútra jám a hyperbolické rotácie s vonkajškom jám. O niečo ľahšie bolo možné tieto riešenia nahliadnuť cez objekty z diferenciálnej geometrie – *vektorové polia* a ich *toky*. Pritom celkové riešenie pre celú oblasť potenciálu sme netradične interpretovali ako *trajektóriu fiktívnej častice* vo fázovom priestore.

V ďalšej kapitole práce sme našu predstavu o pohybe vo fázovom priestore pretavili do konkrétnejšej podoby. Bolo pri tom nutné uvážiť vlastnosti, ktoré vlnovej funkcii udáva kvantová mechanika. Podmienka *normovateľnosti* sa preformovala do faktu, že každá trajektória fiktívnej častice musí začínať a končiť v počiatku. Podmienka *spojitosti* vlnovej funkcie a jej derivácie u nás znamenala spojitosť jednej krivky – trajektórie.

Konkrétna realizácia by nebola možná bez *škálovania osí*. V celej práci sme používali „škálovanie na kružnice“. Takéto škálovanie spôsobilo, že asymptoty hyperbol sa vo fázovom priestore sklápali.

Metódu sme si prvýkrát vyskúšali na najjednoduchšom prípade s *jednou konečnou jamou*. Pochopili sme logiku tvorby trajektórií viazaných stavov. Naučili sme sa ich aj správne interpretovať a získavať z nich vlnové funkcie. Na záver kapitoly sme našli *grafické riešenie* pre energie, ktoré našej metóde zodpovedá.

V poslednej kapitole sme preskúmali rôzne *symetrické* a *asymetrické* potenciály. Všetky prípady boli zdokumentované početnými obrázkami. Na obrázkoch sa buď *porovnávali* jednotlivé viazané stavy, alebo skúmali nejaké *špeciálne situácie*.

Ako aperitív poslúžila prvá časť o *nekonečnej jame*. Ukázalo sa, že v tomto limitnom prípade jednej jamy sa asymptoty hyperbol *nesklápajú*.

Pre *dve jamy* sme najprv zistili, čo spôsobuje ich *vzďaľovanie*. Našli sme graf závislosti energie od vzájomnej vzdialenosti jám. Zaujímavým efektom bolo zlievanie energii dvojíc viazaných stavov a striedanie rastúcej a klesajúcej závislosti.

Neskôr sme zistili, ako na vlnové funkcie vplývajú rôzne umiestené *bariéry*, prípadne aké zmeny nastanú pri *zmene hĺbky* jednej z jám. Zo škálovania potom vyplynulo, že za každú

bariéru získame *nový pár asymptot* hyperbol. Pri rôznych hĺbkach jám bolo treba rozlišovať *dva režimy pohybu*. Pri nízkej energii to bol hyperbolický pohyb v oblasti plytšej jamy. Ak energia presiahla istú hranicu, pohyb sa náhle zmenil na rotačný. Iná hĺbka jamy spôsobila, že príslušnými trajektóriami boli elipsy.

V poslednej časti o *troch jamách* sme znova najprv skúmali závislosť energie od vzdialenosti jám. Tentokrát sme objavili zlievanie energie trojíc viazaných stavov a striedanie dvoch rastúcich a jednej klesajúcej závislosti. Posledným skúmaným potenciálom boli tri jamy s dvomi rovnakými bariérami. Porovnali sme dva efekty: jednak odďaľovanie jám a jednak zvyšovanie bariér.

Treba povedať, že pravouhlé jamy sú dosť špeciálny typ problému. Keďže metóda tieto špecifiká využíva, je dosť *efektívna*. Dúfame, že nikto nie je sklamaný, že pomocou nej nie je možné riešiť aj nejaké zložitejšie úlohy¹⁵. Samozrejme, existujú tradičné nástroje a každý počítač vie diferenciálne rovnice riešiť (aspoň) numericky. Takto sme však získali na problém nový vhľad a čísla ani zďaleka neboli to najdôležitejšie, čo nám metóda poskytla.

Tak, a je to tu. Nebudeme to viac naťahovať. Prichádza záver¹⁶. Dúfame, že si čitateľ z práce niečo odniesol. A že tým niečím nie je pokazená nálada a znechutenie, ale novonadobudnuté nadšenie pre úlohy o pravouhlých jamách, ktorými sme sa tu zaoberali. Veríme, že jamy získali nový šat, a že už prípadne nebudú považované len za nezaujímavý akademický problém.

¹⁵Teoreticky je, ale každý potenciál by bol nutne prerobiť na „schodíkovitý“. Určite by to však chcelo aj väčšiu výpočtovú silu.

¹⁶Pozor! *Záver*, nie *koniec*, veď tu máme ešte dodatky! A hlavne... Zoznam literatúry!!!

Dodatok A

Vektorové polia – všeobecný úvod

Tento dodatok je skrátanou a upravenou verziou rôznych častí z podkapitôl 2.2 a 2.3 v [3]. Má preto veľa spoločného aj s Kapitolou 1 v [5].

A.1 Čo je to vektorové pole?

Vektorové pole zrejme pre nás nie je úplne nový pojem, vo fyzike sa vyskytuje pomerne často. Tu budeme potrebovať len vektorové polia v *rovine*. Takéto pole vieme rozložiť podľa *bázy* (e_x, e_y) , čo sú v každom bode dva jednotkové vektory, jeden v smere osi x , druhý v smere osi y . Všeobecné pole teda vyzerá

$$V = V^x(x, y)e_x + V^y(x, y)e_y. \quad (\text{A.1})$$

Pole je teda zadané funkciami $V^x(x, y)$ a $V^y(x, y)$, ktorým hovoríme *zložky*.

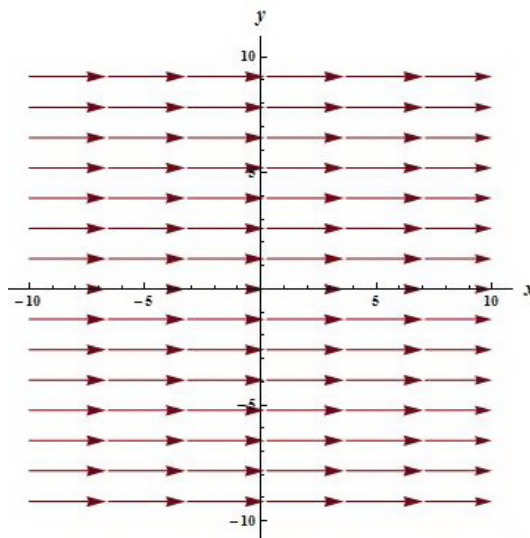
V diferenciálnej geometrii sa *to isté* pole zapíše v tvare *diferenciálneho operátora I. rádu*

$$V = V^x(x, y)\partial_x + V^y(x, y)\partial_y. \quad (\text{A.2})$$

Pripomeňme, že ak sa v matematickej analýze výraz tohoto typu aplikuje na funkciu $f(x, y)$, počíta sa tým jej *smerná derivácia*. Diferenciálna geometria teda stotožňuje pojem smerovej derivácie s pojmom vektora.

[Toto stotožnenie je netriviálne, nebudeme ho tu viac rozvádzať, lebo to detailnejšie pochopiť nepotrebujeme. Poznamenajme len, že smerová derivácia sa robí (ako z názvu vyplýva) v nejakom smere, a teda by nemalo prevapíť, že môže súvisieť s nejakým vektorom, ktorý tiež má nejaký smer.]

Nástrojom na zviditeľnenie vektorového poľa sú integrálne krivky.

Obr. A.1: Vektorové pole $V = \partial_x \equiv 1 \cdot \partial_x + 0 \cdot \partial_y$

A.2 Integrálne krivky

Vektorové pole nám definuje vektor v každom bode. Predstavme si nejakú krivku $(x(t), y(t))$. Pre veľmi špeciálne zvolenú krivku sa môže stať, že jej vektor rýchlosti, t.j. (\dot{x}, \dot{y}) , sa presne zhoduje s vektorom, ktorý je v tomto mieste zadaný vektorovým poľom. Ak toto platí pre *každý* bod tejto krivky, tak ju voláme *integrálnou krivkou* uvažovaného vektorového poľa. Integrálne krivky sa hľadajú riešením takejto sústavy DR *prvého rádu* (detaily pozri v [3])

$$\dot{x} = V^x(x, y) \quad (\text{A.3})$$

$$\dot{y} = V^y(x, y). \quad (\text{A.4})$$

Skúsme napríklad pole $V = \partial_x$. Pre toto pole $V^x = 1$ a $V^y = 0$. Rovnice pre integrálne krivky teda sú

$$\dot{x} = 1 \quad (\text{A.5})$$

$$\dot{y} = 0. \quad (\text{A.6})$$

Ich riešenia teda vyzerajú takto

$$x(t) = t + x_0 \quad (\text{A.7})$$

$$y(t) = y_0. \quad (\text{A.8})$$

Máme teda rovnomerný pohyb v smere x -ovej osi rýchlosťou 1, čo presne zodpovedá obrázku vektorového poľa na Obr. A.1.

Vodorovné čiary v rovine x, y sú zároveň *siločiarami* tohoto vektorového poľa, ako ich poznáme napr. z elektrostatiky. Aký je potom vlastne rozdiel medzi siločiarami a integrálnymi krivkami? Podľa definície, integrálne krivky obsahujú aj časovú závislosť. Čiže máme nielen informáciu o tom, *cez ktoré body* idú (ako je to pre siločiaru), ale aj *kedy* cez ne idú. To znamená, že ide o *parametrizované* krivky.

A.3 Tok

Konkrétna integrálna krivka vektorového poľa V je jednoznačne daná počiatočnými podmienkami – kde sa nachádzame v čase $t = 0$. Tento bod pritom môže byť ľubovoľný. Napríklad v riešení (A.7), (A.8) je bod (x_0, y_0) ľubovoľný bod v rovine. To znamená, že z každého bodu vychádza integrálna krivka. Tým je dané isté zobrazenie roviny do seba (čiže $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$), pri ktorom každý bod „odpláva“ po *svojej* integrálnej krivke o časový úsek t . Toto zobrazenie sa volá *tok vektorového poľa* a označuje sa Φ_t .

Pre naše vektorové pole z rovníc (A.7) a (A.8) vidíme, že bod (x_0, y_0) odpláva do bodu $(x_0 + t, y_0)$. To zapíšeme v štandardnom tvare

$$\Phi_t : (x, y) \mapsto (x + t, y) \quad (\text{A.9})$$

Pre iné vektorové polia môžu byť rovnice (A.3) a (A.4) samozrejme zložitejšie.¹ My sa stretávame s rovnicami tohoto typu v podčastiach (1.3.2) a (1.3.3). Tam sa zaoberáme vektorovými poľami $V = y\partial_x - x\partial_y$ a $V = y\partial_x + x\partial_y$ a ich tokmi. Zistíme, že tieto toky opisujú rotáciu a hyperbolickú rotáciu roviny.

A.4 Príklad

A ako sa teda vektorové polia podľa predpisu (A.2) kreslia? Zrejme tak, ako by sme očakávali. V smere parciálnych derivácií ∂_x a ∂_y nanášame komponenty V_x a V_y , pričom konečný vektor poľa V (=smerová derivácia) je daný ako ich lineárna kombinácia. Teda postup je jednoduchý a presne taký istý ako skladanie vektorov.

Skúsme sa pozrieť na jednoduchý príklad vektorového poľa

$$V = -x\partial_x + y\partial_y. \quad (\text{A.10})$$

Zaujíma nás, ako toto pole vyzerá. Vyskúšajme postup z predošlého odstavca, napríklad v bode $(1, 1)$. Rovnica (A.10) nám hovorí, že máme zobrať mínus násobok jednotky v x -ovom smere a zložiť ho vektorovo s násobkom jednotky v y -ovom smere. Tento krok je znázornený na Obr. A.2. Keby sme tento postup zopakovali pre všetky body priestoru, získali by sme celé vektorové pole². Stačí si teda nechať vykresliť vektory pre zopár bodov a zistíme, ako pole vyzerá. Na Obr. A.3 vidíme, že sa jedná o hyperbolické pole, s asymptotami zhodnými s osami x, y . Poznamenajme, že na oboch obrázkoch sú jednak zakreslené vektory vektorového poľa (červená škála), a jednak jeho integrálne krivky (modrá škála).

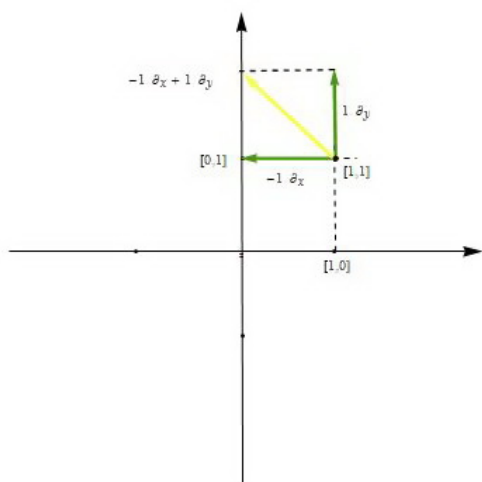
Tento jednoduchý postup nám stačí aj na pochopenie obrázkov pre rôzne hodnoty konštanty k v podčastiach (1.3.2) a (1.3.3).

Veźmeme si napríklad rotačné pole $V = v\partial_\psi - |k|\psi\partial_v$.

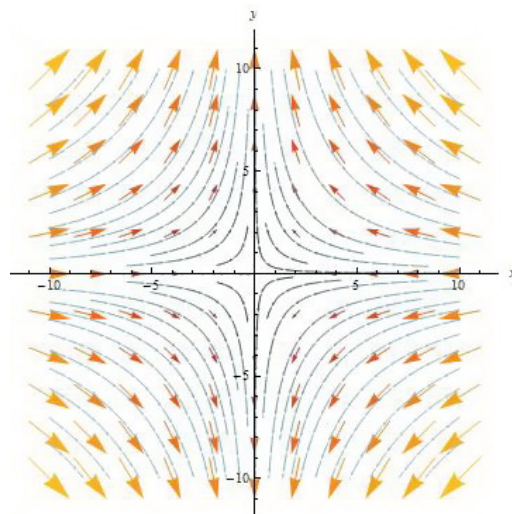
Keď je potom $|k| < 1$, nanášame v každom bode vo vertikálnom smere (v smere osi v) iba k -násobnú časť. Z toho vyplýva, že obrázky elíps budú spľasnuté v smere osi v . Naopak,

¹ Často dokonca nemajú analytické riešenie, vždy sa však dajú riešiť a kresliť numericky.

² To by sme však dokopy nič nevideli, lebo šípka by išla z každého bodu!



Obr. A.2: Konštrukcia vektora v bode (1,1)



Obr. A.3: Celé vektorové pole

keď $|k| > 1$, nanášame vo vertikálnom smere vždy k - násobne viac, a elipsy budú sploštené v smere osi ψ . Je teda jasné, že všeobecné tvrdenie (1.26) platí.

To isté sa samozrejme dá aplikovať aj na hyperboly, kde by platilo rovnaké tvrdenie.

Dodatok B

Jedna jama učebnicovo

Pre porovnanie uveďme, ako sa najjednoduchší problém – jedna jama rieši na hodinách kvantovej mechaniky. Upozorňujeme, že sme doteraz používali inú znamienkovú konvenciu. V tomto dodatku sa budeme držať tej štandardnej, ktorá je, že viazané stavy majú zápornú energiu. Ďalej sme uvažovali, že jama nie je symetricky uložená okolo počiatku a jej dĺžka $L_0 = a$

Máme teda potenciál, ktorý delí priestor na tri oblasti

$$U(x) = \begin{cases} -U_0 & \text{pre } x \in (0, a), \\ 0 & \text{pre } x \notin (0, a). \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

Pre dve oblasti mimo jamy dostávame Schrödingerovu rovnicu

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [0 - E] \psi = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi = \beta^2 \psi \quad (\text{B.2})$$

a pre oblasť jamy

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [-U_0 - E] \psi = -\frac{2m(U_0 + E)}{\hbar^2} \psi = -\alpha^2 \psi. \quad (\text{B.3})$$

Vylúčením asymptoticky nevyhovujúcich členov dostaneme vlnovú funkciu pre tri oblasti nasledovne

$$\psi_I = D e^{\beta x} \quad (\text{B.4})$$

$$\psi_{II} = A \sin \alpha x + B \cos \alpha x \quad (\text{B.5})$$

$$\psi_{III} = C e^{-\beta x}. \quad (\text{B.6})$$

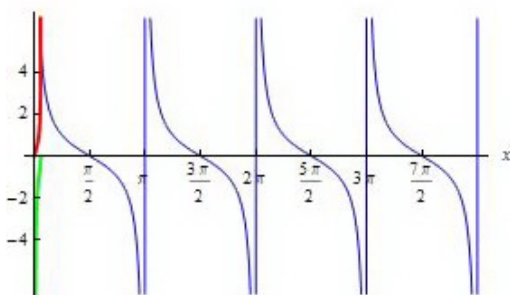
Teraz prichádza na rad *zošívanie* (celková $\psi(x)$ a $\psi'(x)$ musia byť spojité). Dostávame teda podmienky

$$\psi_I(-a) = \psi_{II}(-a) \Leftrightarrow D e^{-\beta a} = -A \sin \alpha a + B \cos \alpha a \quad (\text{B.7})$$

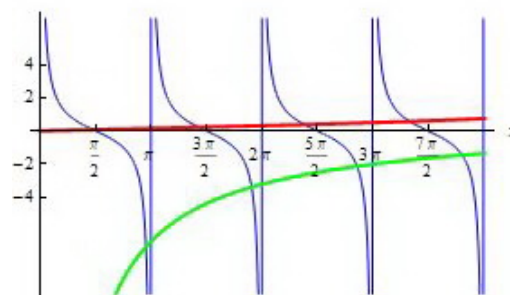
$$\psi'_I(-a) = \psi'_{II}(-a) \Leftrightarrow \beta D e^{-\beta a} = \alpha A \cos \alpha a + \alpha B \sin \alpha a \quad (\text{B.8})$$

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \Leftrightarrow C e^{-\beta a} = A \sin \alpha a + B \cos \alpha a \quad (\text{B.9})$$

$$\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a) \Leftrightarrow -\beta C e^{-\beta a} = \alpha A \cos \alpha a - \alpha B \sin \alpha a. \quad (\text{B.10})$$



Obr. B.1: Veľmi plytká a úzka jama



Obr. B.2: Široká a hlboká jama

Ak zavedieme označenie $(\alpha a)^2 + (\beta a)^2 = \frac{2ma^2 U_0}{\hbar^2} =: R^2$ a $\alpha a =: x$ (čo je samozrejme iné x , ako sme mali doteraz), tak postupnými úpravami môžeme dostať tieto dve riešenia

$$\cot x = \frac{x}{\sqrt{R^2 - x^2}} \quad (\text{B.11})$$

$$\cot x = -\frac{\sqrt{R^2 - x^2}}{x}. \quad (\text{B.12})$$

Teda riešením sú tu priesečníky na grafe, tak ako to môžeme vidieť na Obr. B.1 a Obr. B.2. K príslušným energiám sa môžeme dopátrať spätným dosadením približnej súradnice do vyjadrenia parametra R .

Na Obr. B.1 súčasne vidíme, ako je vždy zaručený aspoň jeden viazaný stav.

Ktoré sú najväčšie nevýhody oproti našemu riešeniu pomocou obrázkov?

1. s pribúdajúcim počtom jám prudko rastie zdĺhavosť výpočtov (veľa parametrov)
2. priamo na grafe nevidno, ktoré riešenia sú párne/nepárne
3. tvar vlnovej funkcie si môžeme iba vypočítať
4. energia sa dá získať len spätne

V skratke by sa to hádam dalo zhrnúť tak, že naša metóda poskytuje všetky potrebné výsledky naraz.

Dodatok C

Mathematica

Tento dodatok je určený predovšetkým pre tých, ktorí s programovaním (ako takým) príliš veľké skúsenosti nemajú. Profíci nech sa mu radšej z diaľky vyhnú. Pre začiatočníka bez skúseností s *Mathematicou*, ktorý by si napr. rád nakreslil obrázky z tejto práce sám, by však mohol byť celkom inšpiratívny.

Všetky obrázky v tejto práci sú vytvorené pomocou *Mathematicy*. Je to veľmi výkonný a účinný nástroj. Od teórie k „praxi“ a optimalizácií však viedlo niekoľko medzikrokov. Najväčšou výhodou je možnosť „naprogramovania“ interaktívnych aplikácií (vyzerajú tak, ako na Obr. 2.10), pritom Mathematica spraví väčšinu za nás. Je to neporovnateľne ľahšie ako programovanie nejakého Java Appletu. Všetky tlačítka a slidery už sú totiž dané. Stačí použiť správny príkaz. Pri hľadaní v návode sú kľúčové pojmy ako „dynamic interactivity“, „manipulation“. Help je napísaný naozaj schopne, žiadne knižky nie sú potrebné.

Aké sú teda spoločné črty všetkých notebookov („hárkov“ s kódom v Mathematice)? Všetky príkazy sú obalené príkazom *Manipulate*[], ktorý určuje hodnotu akých parametrov budeme môcť meniť. U nás teda napríklad energiu a hĺbku jám. Za každý parameter máme k dispozícii jeden slider, automaticky máme možnosť meniť jeho hodnoty aj pomocou tlačítok, alebo nechať zmenu parametra animovať. Pritom dokonca aj rýchlosť je nastaviteľná. Všetko hotové od „výrobcu“.

Grafy sú vykresľované pomocou príkazu *ParametricPlot*[]. Rovnice kriviek pre jednotlivé časti máme dané, sú to: pre vnútra jám vzťah (2.13) a pre vonkajšok (2.14). Ak to problém vyžaduje, treba samozrejme spraviť príslušné škálovanie.

Ak chceme, aby nám súčasne s obrázkom trajektórie vykresľovalo aj vlnovú funkciu (prípadne aj hustotu pravdepodobnosti), treba vnútri príkazu *Manipulate* použiť príkaz *Dynamic*[] a obaliť ním časť pre príkazy na vykreslenie vlnovej funkcie.

Nemenej dôležité sú aj estetické stránky vecí ako farebné rozlíšenie (*PlotStyle*, *TickStyle*, *LabelStyle*). Patrí sa mať aj správne menovky a popis osí (*PlotLabel*, *AxesLabel*). Sprehľadniť výslednú aplikáciu pomôžu aj oddeľovacie čiarky (*Delimiter*). Uloženie tlačítok a sliderov určuje *ControlPlacement*.

Na Obr. C.1 máme kompletný kód najjednoduchšej aplikácie *Jedna jama – viazané stavy* z Obr. 2.10¹. Pre zložitejšie problémy by bol samozrejme dlhší, ale principiálne sa skoro nič nezmení. Pribúdať môžu riadky pre ďalšie časti trajektórií, alebo iné asymptoty (a samozrejme príslušné vlnové funkcie) a nové parametre hĺbky/výšky bariér. Jedine pri tvorbe aplikácie pre dve jamy s rôznou hĺbkou bolo treba rozlíšiť dva prípady a použiť podmienku *If[]*.

Problém nastáva pri zložitejších potenciáloch. Vtedy obrázok nestíha reagovať na pohyb sliderov v reálnom čase a zasekáva sa. Čiastočne sa to dá vylepšiť pomocou *PerformanceGoal -> "Speed"*, najjednoduchšie však je nastaviť, aby slider menil hodnoty až keď ho pustíme (na obrázku s kódom to nemáme, ale na príslušnom mieste by sa použilo *ContinuousAction -> False*).

Hádam by sa patrilo podotknúť, v čom spočíva nepresnosť tejto metódy. Hodnoty energií viazaných stavov vyberáme samozrejme podľa toho, čo vidíme na obrazovke. Obrázok si vždy môžeme priblížiť na ľubovoľne malú škálu, aby sme videli, či nám trajektória na konci ide pekne do počiatku alebo sa zahne mimo. To sa teoreticky dá robiť donekonečna s tým, že stále porovnávame dve čiary konečnej hrúbky², takže dokonalé to nikdy nebude. Veľmi nematematicky povedané je však naša metóda dostatočne presná.

Notebooky pre všetkých osem aplikácií sú napálené na CD ako príloha k práci³. Na ich otvorenie treba mať samozrejme nainštalovanú Mathematicu (verzia aspoň 7). Na spustenie stačí kdekoľvek v notebooku stlačiť Shift+Enter.

¹V kóde je aj hustota pravdepodobnosti.

²Inak by ich nebolo vidieť. :)

³V prípade záujmu a nedostupnosti CD stačí napísať na riflomisa@gmail.com.

```

Manipulate[
  ω1 := √(u+e) ; ω2 := √(u*(1-e)) ;
  x1 := 1.5*√e ; y1 := 1.5*√(1-e) ;
  x2 := (1.5*√e)*Cos[2*ω1] + (1.5*√(1-e))*Sin[2*ω1] ;
  y2 := -(1.5*√e)*Sin[2*ω1] + (1.5*√(1-e))*Cos[2*ω1] ;
  ParametricPlot[
    {10*(2*t-1), 10*√(1-e)/e*(2*t-1)}, {10*(2*t-1), -10*√(1-e)/e*(2*t-1)},
    {x1*t, y1*t},
    {x1*Cos[2*ω1*t]+y1*Sin[2*ω1*t], -x1*Sin[2*ω1*t]+y1*Cos[2*ω1*t]},
    {x2*Cosh[ω2*t]+y2*√e/(1-e)*Sinh[ω2*t], x2*√(1-e)/e*Sinh[ω2*t]+y2*Cosh[ω2*t]}],
    {t, 0, 1}, PlotRange -> r,
    PlotStyle -> {{Thickness[0.005], Red}, {Thickness[0.005], Blue}, {Thickness[0.01], Black}, {Thickness[0.01], Black},
    {Thickness[0.01], Black}},
    PlotLabel -> Column[
      Row[{Style["u0", Italic, Brown, Bold, 20], " = ", Style[u, 20, Bold]}],
      Row[{Style["e", Brown, Bold, 20], " = ", Style[e, 20, Bold]}], Center],
    AspectRatio -> 1, AxesLabel -> {x, y}, LabelStyle -> Directive[Black, Bold, 14],
    TicksStyle -> Directive[Black, 9], PerformanceGoal -> "Speed",
    Style["Jedna jama - viazané stavy", Bold, 14, Orange], Delimiter,
    Style["Hĺbka jamy", Bold, 11], {{u, 40}, 0, 50, 0.5, Appearance -> "Labeled"}, Delimiter,
    Style["Energia", Bold, 11], {{e, 0.045893}, 0.00001, 0.99999, 0.0001, Appearance -> "Labeled"}, Delimiter,
    Style["Veľkosť grafu", Bold, 11], {{r, 2.5}, 0.01, 20, 1, Appearance -> "Labeled"},
    Delimiter, Style["Vlnová funkcia", Bold, 11, Orange],
    Dynamic[ParametricPlot[
      {-1, 3*(2*t-1)}, {1, 3*(2*t-1)},
      {-(1.5*t+1), x1*Cosh[ω2*(-t)] + y1*Sinh[ω2*(-t)]/√(1-e)/e},
      {2*t-1, x1*Cos[2*ω1*t]+y1*Sin[2*ω1*t]},
      {1.5*t+1, x2*Cosh[ω2*t] + y2*Sinh[ω2*t]/√(1-e)/e}],
      {t, 0, 1}, PlotRange -> {{-2.5, 2.5}, {-2, 2}}, AxesLabel -> {t, ψ}, LabelStyle -> Directive[Black, Bold, 13],
      TicksStyle -> Directive[Black, 9], PerformanceGoal -> "Speed",
      PlotStyle -> {{Thickness[0.002], Cyan, Dashed}, {Thickness[0.002], Cyan, Dashed}, {Thickness[0.01], Green},
      {Thickness[0.01], Green}, {Thickness[0.01], Green}}, AspectRatio -> 0.7, ImageSize -> 300]],
    Delimiter, Style["Hustota pravdepodobnosti", Bold, 11, Orange],
    Dynamic[ParametricPlot[
      {-1, 3*(2*t-1)}, {1, 3*(2*t-1)},
      {-(1.5*t+1), (x1*Cosh[ω2*(-t)] + y1*Sinh[ω2*(-t)]/√(1-e)/e)^2},
      {2*t-1, (x1*Cos[2*ω1*t]+y1*Sin[2*ω1*t])^2},
      {1.5*t+1, (x2*Cosh[ω2*t] + y2*Sinh[ω2*t]/√(1-e)/e)^2}],
      {t, 0, 1}, PlotRange -> {{-2.5, 2.5}, {0, 2.5}}, AxesLabel -> {t, |ψ|^2}, LabelStyle -> Directive[Black, Bold, 13],
      TicksStyle -> Directive[Black, 9], PerformanceGoal -> "Speed",
      AspectRatio -> 0.5, PlotStyle -> {{Thickness[0.002], Cyan, Dashed}, {Thickness[0.002], Cyan, Dashed}, {Thickness[0.01], Green},
      {Thickness[0.01], Green}, {Thickness[0.01], Green}}, ImageSize -> 300]],
    ControlPlacement -> Left]

```

definovanie premenných

asymptoty

tri časti trajektórie

zrýchlenie...

hodnoty pre parametre

tri časti vlnovej funkcie

tri časti hustoty pravdepodobnosti

Obr. C.1: Kód v *Mathematice* pre jednu jama

Literatúra

- [1] Fecko, Marián
Jednoduchá vizualizácia riešení (bezčasovej, jednorozmernej) Schrödingerovej rovnice.
Bratislava, nepublikované, (2008)
- [2] Fecko, Marián
An alternative way to work out stationary wave functions of some one-dimensional systems.
Bratislava, nepublikované, (2009)
- [3] Fecko, Marián
Diferenciálna geometria a Lieove grupy pre fyzikov.
Bratislava, Iris - 2. vydanie, (2008)
- [4] Griffiths, David J.
Introduction to Quantum Mechanics.
USA, Pearson Prentice Hall - 2. vydanie, (2005)
- [5] Klaudíniová, Jana
Hamiltonovský pohľad na dynamiku v kvantovej mechanike.
Bratislava, Bakalárska práca, (2009)
- [6] Oetiker T., Partl H., Hyna I., Schlegl E.
The Not So Short Introduction to L^AT_EX 2_ε.
internet, (2010)
- [7] Pišút J., Gomolčák L., Černý V.
Úvod do kvantovej mechaniky.
Bratislava, Alfa - 2. vydanie, (1983)
- [8] Reckdahl, Keith
Using Imported Graphics in L^AT_EX and pdfL^AT_EX.
internet, (2006)

ZADANIE ZÁVEREČNEJ PRÁCE

Meno a priezvisko študenta: Michaela Rifliková
Študijný program: fyzika (Jednoodborové štúdium, bakalársky I. st., denná forma)
Študijný odbor: 4.1.1. fyzika
Typ záverečnej práce: bakalárska
Jazyk záverečnej práce: slovenský

Názov: Pravouhlé jamy v kvantovej mechanike - alternatívny prístup

Cieľ: Úlohy o hľadani energií a vlnových funkcií stacionárnych stavov v pravouhlých jamách sa bežne riešia tak, že sa nájde všeobecné riešenie v jame (sínus a kosínus) a mimo jamy (rastúce a klesajúce exponenty) a tieto riešenia sa na okrajoch jamy zošívajú (tak, aby bola vlnová funkcia a jej prvá derivácia spojitá). Pritom sa pamätá na normovateľnosť výsledného riešenia. Pre konečnú a symetrickú jamu vedú podmienky zošitia na transcendentné rovnice, ktoré sa dajú riešiť graficky alebo numericky. Podobne by sa riešili iné pravouhlé jamy, napríklad nesymetrická, dvojité a podobne.

Ukazuje sa, že k tejto úlohe sa dá pristupovať aj ináč. Schroedingerova rovnica sa dá prepísať na sústavu dvoch obyčajných diferenciálnych rovníc, ktorá opisuje pohyb istého fiktívneho bodu vo vhodnej dvojrozmernej rovine. Na úsekoch, ktoré zodpovedajú vnútru jamy, sa bod rovnomerne krúti okolo počiatku a na úsekoch mimo jamy vykonáva hyperbolickú rotáciu (známu z opisu Lorentzových transformácií). Podmienky zošívania sa tu javia ako spojitosť krivky a normovanosť výsledného riešenia ako podmienka, aby sa pohyb bodu začal aj skončil v počiatku roviny.

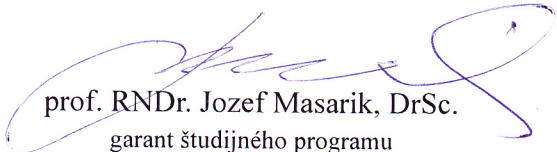
Tým sa úloha hľadania vlnových funkcií zvedie na úlohu nájdenia trajektórií tohoto fiktívneho bodu, ktoré vyhovujú spomínaným dodatočným podmienkam. Riešenia tejto úlohy sa dajú ľahko intuitívne nahliadnuť (vrátane rôznych vlastností zodpovedajúcich riešení vlnovej funkcie) a ľahko sa tiež skusmo hľadajú pomocou obrázkov kreslených (napr.) v systéme Mathematica. Takto sa tiež dajú kresliť trajektórie bodov v zložitejších jamách (napríklad pre sústavu dvoch či troch jam) a získavať ich vlnové funkcie a energie.

Náplňou práce by bolo zoznámiť sa s touto metódou a použiť ju na preskúmanie konkrétnych, aj dvojitých a trojitých pravouhlých jam. T.j. napísať notebooky v systéme Mathematica, ktoré hľadajú povolené stavy - kreslia zodpovedajúce obrázky, im príslušné vlnové funkcie a vypisujú správne energie hladín.)

Vedúci: doc. RNDr. Marián Fecko, PhD.
Katedra: FMFI.KTFDF - Katedra teoretickej fyziky a didaktiky fyziky

Dátum zadania: 11.10.2010

Dátum schválenia: 26.10.2010


prof. RNDr. Jozef Masarik, DrSc.
garant študijného programu

Roflík

.....
student

M. Fečko

.....
Vedúci