11. ročník, úloha III . S ... *vlnové funkce* *(6 bodů; průměr ?; řešilo 21 studentů)*

a) V kvantové mechanice má smysl řešit i jednorozměrné úlohy, to znamená uvažovat částice, které se mohou pohybovat pouze ve směru osy x a jejichž vlnová funkce $\psi(x)$ závisí pouze na x. Podívejme se na nejjednodušší z nich, na částici v „nekonečně hluboké potenciálové jámě". Tím máme na mysli částici, která se nemůže vyskytovat jinde, než v oblasti $x \in (0, L)$, takže její vlnová funkce je vně této „jámy" o šířce L nulová. Uvnitř potenciálové jámy se částice může pohybovat zcela volně, protože na ni nepůsobí žádné síly. Obrazně řečeno, uvnitř nekonečné potenciálové jámy má částice potenciální energii nulovou a vně nekonečnou. Vaším úkolem je napsat vlnové funkce odpovídající všem možným stavům systému, víte-li, že každá vlnová funkce této částice je v intervalu $\langle 0, L\rangle$ harmonická (tj. ve tvaru $c_1 \sin(kx) + c_2 \cos(kx)$, $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$, $k \in \mathbb{R}$) a na jeho krajích nulová. S pomocí faktu, že perioda této harmonické funkce je rovna de Broglieho vlnové délce, určete všechny možné energie, které částice může mít. Nakonec se ještě pokuste získané vlnové funkce nanormovat.

b) Vypočítejte, s jakou pravděpodobností se elektron nachází v jádře iontu He^+, když je ve stavu 1s, kterému odpovídá normovaná vlnová funkce:

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}}\, \mathrm{e}^{-Zr/a_0}\,, \qquad r = |\boldsymbol{r}|\,,$$

kde Z je protonové číslo helia a a_0 Bohrův poloměr atomu vodíku. Pokud tuto pravděpodobnost neumíte vypočítat přesně, pokuste se ji odhadnout seshora i zezdola, abychom znali alespoň její řád.

c) Napište prostorovou závislost $\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ vlnové funkce soustavy dvou elektronů v základním stavu atomu helia při zanedbání interakce mezi nimi.

a) Vlnová funkce částice v nekonečně hluboké potenciálové jámě je obecně tvaru

$$\psi(x) = c_1 \sin(kx) + c_2 \cos(kx)\,.$$

Abychom splnili podmínku $\psi(0) = 0$, musí být $c_2 = 0$

$$\psi(x) = c_1 \sin(kx)\,.$$

Z druhé podmínky $\psi(L) = 0$ pak dostaneme

$$k = \frac{n\pi}{L}\,, \qquad n \in \mathbb{Z}.$$

Protože funkce $\sin(kx)$ a $\sin(-kx)$ jsou závislé (druhá je jen mínus jedničkou pronásobená první), odpovídají stejnému stavu, a nevynecháme tedy žádnou možnou vlnovou funkci, pokud záporná n nebudeme uvažovat. Musíme také vyloučit případ $n = 0$, protože jemu odpovídá identicky nulová vlnová funkce. Výraz z minulé kapitoly udávající hustotu pravděpodobnosti pro ni nemá smysl (nelze dělit nulou), a proto identicky nulová vlnová funkce neodpovídá žádnému fyzikálnímu stavu. Všechny možné vlnové funkce naší částice jsou tedy dány předpisem

$$\psi(x) = c_1 \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\,, \qquad n \in \mathbb{N}\,.$$

Vlnová délka částice v n-tém stavu je

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2L}{n}\,,$$

takže jí odpovídá energie

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2} = \frac{n^2h^2}{8mL^2}\,.$$

Chceme-li mít funkci ψ normovanou, musíme zvolit c_1 tak, aby byl interál z druhé mocniny její absolutní hodnoty roven jedné

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x = 1 \quad \Rightarrow \quad \int_0^L |c_1|^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\mathrm{d}x = 1$$

a protože střední hodnota druhé mocniny sinu na celé půlperiodě je 1/2 a délka intervalu je L, lze podmínku přepsat jako

$$|c_1|^2\frac{L}{2} = 1\,,$$

odkud plyne

$$c_1 = \sqrt{\frac{2}{L}}\,j\,,$$

kde j je libovolná komplexní jednotka. Vzhledem k tomu, že fáze naší vlnové funkce není podstatná, můžeme zvolit například $j = 1$

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\,, \qquad n \in \mathbb{N}\,.$$

b) Pokud označíme poloměr jádra helia R, bude pravděpodobnost výskytu elektronu v jádře

$$P = \int_\Omega |\psi|^2\,\mathrm{d}V = \int_0^R |\psi|^2 4\pi r^2\,\mathrm{d}r\,,$$

protože objem kulové slupky o poloměru r a tloušťce $\mathrm{d}r$ je $\mathrm{d}V = 4\pi r^2\,\mathrm{d}r$. Užijeme-li konkrétní tvar vlnové funkce, dostaneme

$$P = \int_0^R \frac{Z^3}{\pi a_0^3}\,\mathrm{e}^{-2Zr/a} 4\pi r^2\,\mathrm{d}r = 1 - \left(1 + 2Z\frac{R}{a_0} + 2Z^2\frac{R^2}{a_0^2}\right)\mathrm{e}^{-2ZR/a_0}\,.$$

Po dosazení $Z = 2$ a $R = 3{,}1\cdot 10^{-5}a_0$ vychází $P = 3\cdot 10^{-13}$.

c) Zanedbáme-li interakci mezi elektrony, můžeme říct, že jejich společná vlnová funkce je dána přímým součinem příslušných jednočásticových vlnových funkcí

$$\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \frac{Z^3}{\pi a_0^3}\,\mathrm{e}^{-\frac{Zr_1}{a_0}}\,\mathrm{e}^{-\frac{Zr_2}{a_0}}\,.$$

Michal Fabinger

Fyzikální korespondenční seminář je organizován studenty UK MFF. Je zastřešen Oddělením pro vnější vztahy a propagaci UK MFF a podporován Ústavem teoretické fyziky UK MFF, jeho zaměstnanci a Jednotou českých matematiků a fyziků.