

POZNÁMKA K ANALOGII

„STACIONÁRNÍ KVANTOVÝ STAV – STOJATÁ VLNA NA STRUNĚ“*

Aleš Lacina, Přírodovědecká fakulta MU v Brně

1. Úvod

Při kvalitativních výkladech jeví mikrověta se dělají mnohá zjednodušení. Reálná situace se nahrazuje jednoduchým modelem, na němž lze zhruba vyložit základní vlastnosti studovaného systému. Charakteristické rysy chování objektu, jehož pohyb je omezen na konečnou oblast prostoru se nejčastěji demonstrují na případu částice vázané na úsečce (v jednorozměrné nekonečně hluboké pravoúhlé potenciálové jámě). Jedním z nejzajímavějších výsledků, k nimž vede uvěznění částice, je kvantování její energie. Při kvantově mechanickém popisu vychází tento efekt jako důsledek standardních podmínek kladených na vlnovou funkci získanou řešením Schrödingerovy rovnice. V populárně vědecké literatuře a učebnicích nižších typů škol se často užívá analogie mezi stacionárním stavem uvězněné částice a stojatou vlnou na struně - např. [1-7]. Tento postup vychází z de Broglieovy hypotézy a existenci diskrétní posloupnosti stacionárních stavů (kvantování energie) vysvětluje jako důsledek vlnových vlastností částice. Ve tvaru, v němž je běžně používán, však dává kromě některých správných výsledků (energieové spektrum) i celou řadu nesprávných představ uvězněné částici.

2. Ukázka standardního postupu výkladu

Podle de Broglieovy hypotézy je každému objektu přiřazena vlna, jejíž délka λ je jednoznačně spojena s velikostí jeho impulsu p

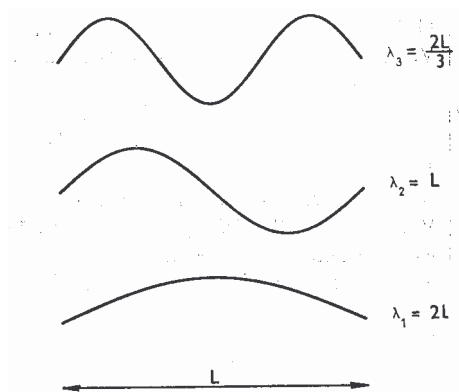
$$(1) \quad \lambda = \frac{h}{p}$$

Pro částici, jejíž pohyb je omezen pouze na úsečku délky L , však mohou být stabilní (stacionární) jen takové stavy, kdy se na tuto úsečku uloží právě celistvý počet půlvln.

$$(2) \quad L = n \frac{\lambda_n}{2}, \quad n = 1, 2, 3,$$

* Věnováno k šedesátinám doc. Dr. M. Černožského, CSc.

Situace je zcela analogická stojatým monochromatickým vlnám na struně délky L – viz obr. 1.



Obr. 1.

Zkombinováním vztahů (1) a (2) dostáváme pro velikost impulsu částice v těchto stavech

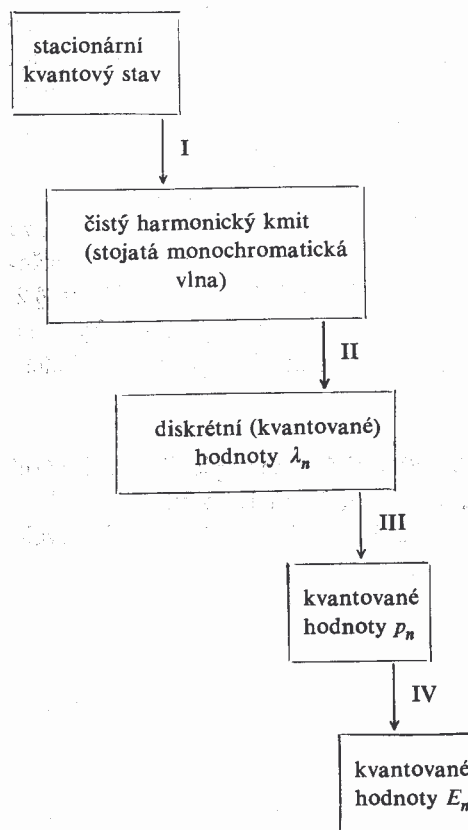
$$(3) \quad p_n = \frac{nh}{2L} = \frac{n\pi\hbar}{L}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Tomu odpovídají energie

$$(4) \quad E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Částice, která je vázána na úsečku délky L má tedy diskrétní energieové spektrum.

Logická struktura předvedeného postupu je přehledně ukázána v následující tabulce.



Tabulka I (převzato z [6]).

3. Kritika standardního postupu výkladu

Na první pohled vypadá předcházející ukázka bezchybně. Abychom uviděli, v čem jsou její slabiny, projdeme § 2 znovu a budeme při tom užívat přesnějších formulací.

3.1. Podle de Broglieovy hypotézy je každému objektu pohybujícímu se s impulsem p ve směru osy x přiřazena rovinná monochromatická postupná vlna

$$(5) \quad \varphi_p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{h}} e^{i[(p/\hbar)x - (E/\hbar)t]},$$

$$x \in (-\infty, +\infty),$$

jejíž délka je spojena s velikostí jeho impulsu vztahem (1) [9]. De Broglieova vlna (5) je vlastní funkcí operátoru impulsu příslušnou vlastní hodnotě p . Superponujeme-li tuto vlnu s funkcí téhož operátoru příslušnou vlastní hodnotě $-p$, dostaneme stojatou monochromatickou vlnu

$$(6a) \quad \Psi(x, t) = \frac{2}{\sqrt{h}} \cos \frac{p}{\hbar} x e^{-i(E/\hbar)t},$$

$$x \in (-\infty, +\infty),$$

resp.

$$(6b) \quad \Psi(x, t) = \frac{2}{\sqrt{h}} \sin \frac{p}{\hbar} x e^{-i(E/\hbar)t},$$

$$x \in (-\infty, +\infty).$$

(Tyto funkce již nejsou vlastními funkcemi operátoru impulsu, jsou však vlastními funkcemi operátoru kvadrátu impulsu.) Požadujeme-li vynulování těchto funkcí na koncích uvažované úsečky (počátek souřadnic je zvolen v jejím středu), dostaneme z (6a)

$$(7a) \quad p_{2k-1} = \frac{(2k-1)\pi\hbar}{L},$$

$$k = 1, 2, 3, \dots$$

a z (6b)

$$(7b) \quad p_{2k} = \frac{2k\pi\hbar}{L}, \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

Dosazením takto vybraných hodnot do (6)

$$(8a) \quad \Psi_{2k-1}(x, t) =$$

$$= \frac{2}{\sqrt{h}} \cos \frac{(2k-1)\pi x}{L} e^{-i(E_{2k-1}/\hbar)t},$$

$$(8b) \quad \Psi_{2k}(x, t) =$$

$$= \frac{2}{\sqrt{h}} \sin \frac{2k\pi x}{L} e^{-i(E_{2k}/\hbar)t},$$

$$x \in (-\infty, +\infty),$$

To je stejný výsledek, jaký se dostává pro vlastní kmity struny délky L (počátek souřadnic je umístěn ve středu struny) [10], [11] - srv. obr. 1. Neshoda v intervalech, na nichž jsou funkce (8) a funkce popisující výchylky struny definovány, je pouze zdánlivá, neboť na strunu konečné délky se pohlíží jako na součást struny nekonečné (viz např. [10], str. 68).

Stojaté vlny (8) jsou - jako všechny monochromatické vlny - vlnami nekonečnými. Nepopisují tedy stavy částice vázané na úsečku $x \in \langle -L/2, L/2 \rangle$, ale stavy volné částice, které vyhovují podmínce

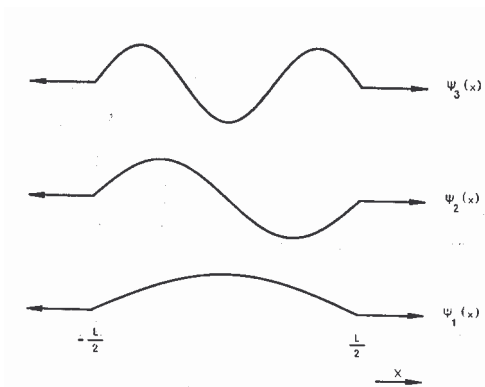
$$(9) \quad \Psi\left(-\frac{L}{2}, t\right) = \Psi\left(\frac{L}{2}, t\right) = 0.$$

Jsou společnými vlastními funkcemi operátoru kvadrátu impulsu a hamiltoniánu volné částice ($V(x) = \text{const.}$, $x \in (-\infty, +\infty)$), nikoliv však hamiltoniánu částice uvězněné v oblasti $x \in \langle -L/2, L/2 \rangle$. Díky tomu lze v případě volné částice užít vztahu (4) spojujícího vlastní hodnoty kvadrátu impulsu s příslušnými vlastními hodnotami hamiltoniánu.

Volná částice, jejíž vlnová funkce vyhovuje podmínkám (9), může tedy mít jen zcela určité hodnoty velikosti impulsu p_n (7), resp. (3) a energie E_n (4).

Původně jsme však chtěli studovat energiové spektrum částice uvězněné v oblasti délky L . Jak jsme se vůbec dostali k vyšetřování volné částice? Na začátku § 2 jsme z hlediska klasické mechaniky zcela samozřejmě předpokládali, že uvažovaná částice má určitý impuls. V kvantové mechanice však tento předpoklad triviální není. Ostrou hodnotu impulsu (resp. kvadrátu impulsu) lze naměřit pouze ve vlastních stavech operátorů těchto veličin, tj. u volné částice. Tím, že jsme připsali studované částici určitou hodnotu velikosti impulsu (tj. určitou de Broglieovu vlnovou délku), jsme tedy vlastně uvažovali o částici volné. (Komentáře v § 2, které hovoří o omezení jejího pohybu na ohraničenou oblast, jsou proto zavádějící.)

3.2. Vlnové funkce popisující stacionární stavy částice, která je uzavřena v oblasti $x \in \langle -L/2, L/2 \rangle$ jsou vně tohoto intervalu nulové.



Obr. 2.

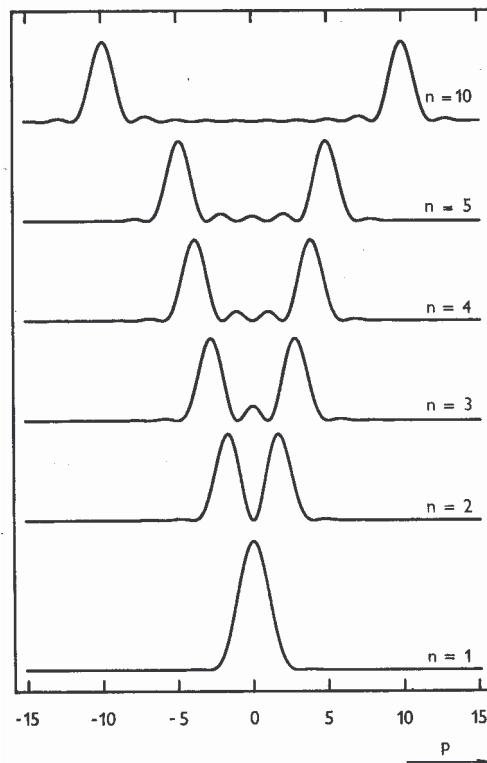
$$\begin{aligned}
 (10a) \quad \Psi_{2k-1}(x, t) &= \\
 &= \begin{cases} \sqrt{\left(\frac{2}{L}\right)} \cos \frac{(2k-1)\pi x}{L} e^{-i(E_{2k-1}/\hbar)t}, & x \in \langle -L/2, L/2 \rangle \\ 0, & x \notin \langle -L/2, L/2 \rangle \end{cases} \\
 & \quad k = 1, 2, 3, \dots \\
 (10b) \quad \Psi_{2k}(x, t) &= \\
 &= \begin{cases} \sqrt{\left(\frac{2}{L}\right)} \sin \frac{2k\pi x}{L} e^{-i(E_{2k}/\hbar)t}, & x \in \langle -L/2, L/2 \rangle \\ 0, & x \notin \langle -L/2, L/2 \rangle \end{cases} \\
 & \quad k = 1, 2, 3, \dots
 \end{aligned}$$

Na rozdíl od funkcí (8), popisujících stavy volné částice, nejsou funkce (10) monochromatickými vlnami, ale vlnovými kluby. Nejsou tedy vlastními funkcemi kvadrátu impulsu, ale jejich superpozicemi. Ve stavech popsaných funkcemi (10) proto nemá kvadrát impulsu určitou hodnotu. Abychom zjistili spektrum impulsu, popř. velikosti impulsu vázané částice v jejím stacionárním stavu, musíme rozvinout funkci (10) do vlastních funkcí operátoru \hat{p} (5), popř. operátoru \hat{p}^2 (6). Vzhledem k tomu, že rozkládaná funkce (10) není periodická v intervalu $(-\infty, +\infty)$, nebude tímto rozvojem Fourierova řada (diskrétní spektrum p , resp. J), ale Fourierův integrál (spojité spektrum p resp. J) (např. [10], [12]) - viz obr. 3. Tím padá hlavní argument diskutovaného postupu pro kvantování energie (kvantovaný impuls). Vztahu (4) ostatně rovněž nelze použít pro výpočet energiového spektra,

poněvadž (celková) energie a kvadrát impulsu nejsou současně přesně měřitelné.

Postup vyložený v § 2 je tedy správný jen pro volnou částici (pro niž jsou předepsány "kvantové podmínky" (9)). Při studiu částice, jejíž pohyb je omezen na konečnou oblast prostoru se s ním rozejdeme hned v kroku I (viz tab. I).

3.3. Obsah § 2 tedy nelze přijmout jako vysvětlení kvantování energie vázané částice. Jeho logická struktura je totiž ve skutečnosti tato:



Obr. 3. Hustota pravděpodobnosti naměření různých hodnot impulsu pro částici nacházející se v n -tém stacionárním stavu Ψ_n (10) v jednorozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámě délky L . Impuls je udáván v násobcích $\pi\hbar/L$. S rostoucím n klesá relativní velikost rozmytí impulsu $\delta p/P$ nejpravděpodobněji. Příslušný výpočet je proveden v příloze.

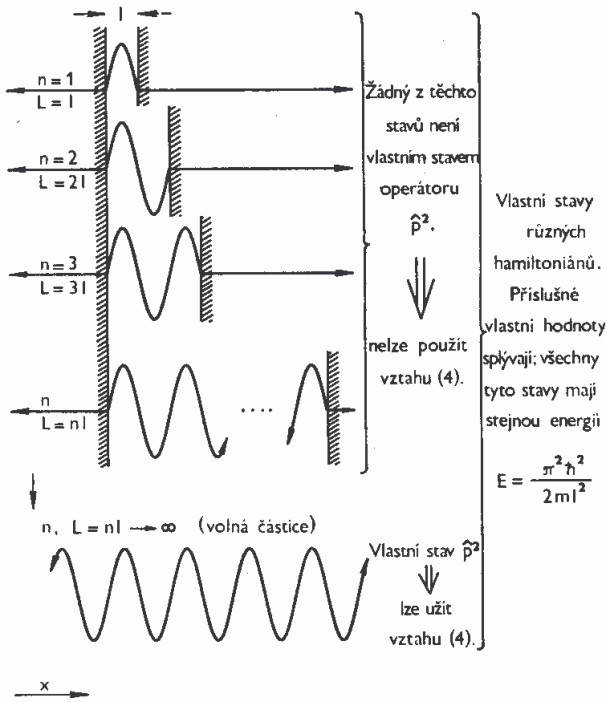
Stacionární stav částice, jejíž pohyb je omezen na úsečku délky L (klubko stojatých monochromatických vln) je přiřazením určité de Broglieovy vlnové délky (tj. určité hodnoty velikosti impulsu) prohlášen stojatou monochromatickou vlnou.



Obr. 4.



Obr. 5.



Obr. 6a. Vlnové funkce stacionárních stavů částic uzavřených v nekonečně hlubokých potenciálových jámách s různými délkami L . Pro energii n -tého stacionárního stavu částice uzavřené v jednorozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámě délky L platí

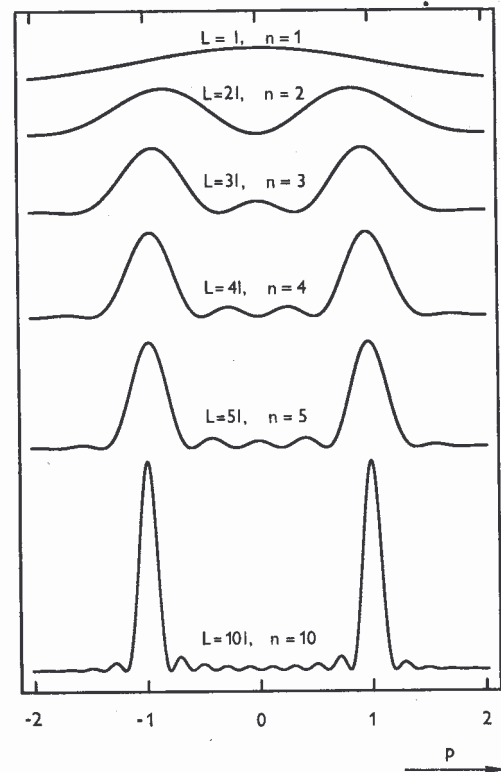
$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n}{L}\right)^2.$$

Tento přechod, kterým se vlastně dělá krok I v tabulce I, odpovídá, jak již bylo řečeno, "uvolnění částice z vazeb". Všechny následující úvahy jsou tedy správné jen pro částici volnou, jejíž vlnová funkce je ve dvou zadaných bodech nulová (obr. 5). Výsledky se však vydávají za platné pro částici vázanou (obr. 4). Za "matematickou jednoduchost" takového popisu se platí celou řadou nesprávných představ o uvězněné částici. Kromě již zmíněného nesprávného tvaru vlnové funkce vně uvažované úsečky se všemi jeho důsledky[†] je to předpoklad o určité hodnotě velikosti impulsu částice,

[†] Zdůrazněme, že pro úspěch této metody výkladu je životně důležité udržet pozornost pozorovatele uvnitř nekonečně hluboké jámy modelující povolenou oblast. Jinak by totiž přišel na to, že částice, o níž jsme prohlásili, že je uvězněna (a kvantování její energie jsme "vysvětlili" jako důsledek tohoto uvěznění) se může ve skutečnosti nacházet i vně této oblasti (dokonce s mnohem větší pravděpodobností než uvnitř).

kvantování impulsu a současná měřitelnost kvadrátu impulsu a (celkové) energie. Zvláště nepříznivým dojmem působí skutečnost, že získání závěrečného správného výsledku - diskrétního energiového spektra - je přímo založeno na těchto scestných představách.

Je zajímavé, že hodnoty energie vycházejí zcela přesně. To však nemůže sloužit za důkaz správnosti postupu. (Vzpomeňme na podobný případ s Bohrovým modelem atomu vodíku.) Příčinou této shody je rovnost energií stacionárního stavu volné částice popsaného vlnovou funkcí (8) a stacionárního stavu vázané částice, který je zadán vlnovou funkcí (10) - viz obr. 6.



Obr. 6b. Hustota pravděpodobnosti naměření různých hodnot impulsu ve stavech diskutovaných v obr. 6a. Impuls se měří v násobcích $\pi\hbar/l$. (Příslušný výpočet je proveden v příloze.) S rostoucím n se toto rozdělení zostřuje;

$$\lim_{n \rightarrow \infty} w_n(p) = \frac{1}{2} \delta \left(p + \frac{\pi\hbar}{l} \right) + \frac{1}{2} \delta \left(p - \frac{\pi\hbar}{l} \right).$$

4. Závěr

Vyložili jsme, že metoda určení energiového spektra částice uvězněné na úsečce založená na analogii mezi stacionárním stavem a stojatou monochromatickou vlnou má závažné nedostatky. Nemůže být proto považována za vysvětlení kvantování energie, ale nanejvýš za mnemotechnickou pomůcku umožňující snažší

smíření s tímto zajímavým efektem. Její použití přitom v sobě skrývá nebezpečí: nesprávné mezivýsledky postupu vytvářejí fyzikálně pochybenou představu o studované částici. Z tohoto hlediska situace silně připomíná všeobecně známý případ s Bobrovou teorií atomu vodíku, která je rovněž nesprávnou cestou ke správnému výsledku. Oblíbená analogie byla postavena do velmi špatného světla, ale žádný alternativní, stejně jednoduchý a přitom korektní, postup navržen nebyl. Autor přiznává, že neví o žádném takovém vysvětlení, které by se hodilo do elementárních výkladů. Zastává však názor, že při prvním seznamování se základními idejemi kvantové mechaniky není třeba "vysvětlovat" kvantování veličin. Spíše by se měla preferovat výchova ke správnému fyzikálnímu myšlení. Např. na podrobném rozboru difrakčních pokusů přesvědčivě ukázat omezení platnosti klasické mechaniky [13]. I uvedená analogie zde může vykonat dobré služby. (Přechod od klasického nazírání ke kvantově mechanickému je přijetím de Broglieovy hypotézy již částečně proveden.) Nesmí se však použít v kritizovaném tvaru

"stacionární stav – stojatá monochromatická vlna",
ale ve tvaru

"stacionární stav - stojatá vlna (vlnové klubko)".

Fourierovou analýzou (viz příloha) - třeba jen naznačenou [14] - se dostaneme k představě neurčitěho impulsu. (Nesprávné úvahy § 2 jsou z tohoto hlediska krokem zpět ke klasickému pohledu.) K energiovému spektru však tudy cesta nevede. Je nepochybné, že někteří autoři užívající kritizovaný postup si byli vědomi uvedených nedostatků a zařazují jej pouze z pedagogických důvodů. V jejich výkladech se totiž objevuje zpravidla až těsně před probíráním vlastností atomů, k jejichž objasnění je třeba mít správnou kvalitativní představu o energiovém spektru elektronů. Na tomto místě je již tedy nutné o kvantování energie promluvit a je jistě didakticky vhodnější takovou novou skutečnost "nějak přirozeně vysvětlit" než ji jenom konstatovat. Pokusení je zde o to větší, že posluchač, pro nějž je výklad určen, může jen stěží na své úrovni nějaké rozpory odhalit.

Ponecháváme diskusi, zda se mají názornosti výkladu - byť úvodního - dělat tak velké ústupky. Nebezpečí upevnění nesprávného pohledů na mikrosvět by se však nemělo podceňovat. Dobrým příkladem toho, kam až může vést zafixovaná nesprávná představa, je § 8.3 ve vysoko-školské učebnici [8].

Příloha. Výpočet impulsového spektra částice uvězněné v oblasti $x \in \langle -L/2, L/2 \rangle$

Hustota pravděpodobnosti naměření různých hodnot impulsu $W_n(p, t)$ v určitém stavu n je dána kvadrátem absolutní hodnoty vlnové funkce tohoto stavu v impulsové reprezentaci $\Phi_n(p, t)$. Transformací funkcí (10) vyjádřených v souřadnicové reprezentaci podle obecného vztahu

$$\Phi_n(p, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n(x, t) \varphi_p^*(x, t) dx$$

(zde $\varphi_p(x, t) = 1/\sqrt{h} \exp [i/ħ(px - (p^2/2m)t)]$ je vlastní funkce operátoru impulsu v souřadnicové reprezentaci (5) se dostane

$$\begin{aligned} \Phi_{2k-1}(p, t) = & \\ = \sqrt{\frac{2}{Lh}} & \left\{ \frac{\sin \left[\frac{(2k-1)\pi}{L} + \frac{p}{\hbar} \right] \frac{L}{2}}{\frac{(2k-1)\pi}{L} + \frac{p}{\hbar}} + \right. \\ & \left. + \frac{\sin \left[\frac{(2k-1)\pi}{L} - \frac{p}{\hbar} \right] \frac{L}{2}}{\frac{(2k-1)\pi}{L} - \frac{p}{\hbar}} \right\} \times \\ & \times \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(E_{2k-1} - \frac{p^2}{2m} \right) t \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Phi_{2k}(p, t) = & \\ = i \sqrt{\frac{2}{Lh}} & \left\{ \frac{\sin \left[\frac{2k\pi}{L} + \frac{p}{\hbar} \right] \frac{L}{2}}{\frac{2k\pi}{L} + \frac{p}{\hbar}} - \right. \\ & \left. - \frac{\sin \left[\frac{2k\pi}{L} - \frac{p}{\hbar} \right] \frac{L}{2}}{\frac{2k\pi}{L} - \frac{p}{\hbar}} \right\} \times \\ & \times \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(E_{2k} - \frac{p^2}{2m} \right) t \right], \end{aligned}$$

$p \in (-\infty, +\infty)$, $k = 1, 2, 3, \dots$

Odtud

$$\begin{aligned} w_n(p, t) = |\Phi_n(p, t)|^2 = & \\ = \frac{2}{Lh} & \left\{ \frac{\sin \left[\frac{n\pi}{L} + \frac{p}{\hbar} \right] \frac{L}{2}}{\frac{n\pi}{L} + \frac{p}{\hbar}} + \right. \\ & \left. + (-1)^{n+1} \frac{\sin \left[\frac{n\pi}{L} - \frac{p}{\hbar} \right] \frac{L}{2}}{\frac{n\pi}{L} - \frac{p}{\hbar}} \right\}^2, \end{aligned}$$

$p \in (-\infty, +\infty)$, $n = 1, 2, 3, \dots$

Pro některé stacionární stavy byla tato funkce počítána numericky na stolním kalkulátoru HP 9825A. Výsledky těchto výpočtů jsou shrnuty v obrázcích 3 a 6b.

Literatura

- [1] R. E. PEIERLS: *Zákony přírody*. Orbis Praha 1963.
- [2] M. V. VOLKENŠTEJN: *Křižovatky vědy*. Horizont Praha 1979.
- [3] L. N. COOPER: *Fizika dlja vseh 2*. Mir Moskva 1964.
- [4] G. MARX: *Přírodovědné vzdělávání v Maďarsku*. PMFA 24, č. 6 (1979) 339.
- [5] J. PIŠŮT: *O vyučování základov kvantovej fyziky na gymnáziach*. MFvŠ 8, č. 7 (1977/ 178) 543.
- [6] J. PIŠŮT: *O kvantách vlnách a atónoch - III*. Matematicko-fyzikální rozhledy 59, č. 4 (1980/81) 159.
- [7] D. LEHOTSKÝ A KOL.: *Fyzika pro IV. ročník gymnázia, experimentální učební text*. SPN Praha 1982.
- [8] A. BEISER: *Úvod do moderní fyziky*. Academia Praha 1975.
- [9] P. A. M. DIRAC: *The Princip/es of Quantum Mechanics*. Oxford University Press 1958, str. 119.
- [10] F. S. GRAWFORD: *Vo/ny (Berk/eevskij kurs fiziki, tom III)*. Nauka Moskva 1974.
- [11] M. BRDIČKA: *Mechanika kontinua*. NČSAV Praha 1959.
- [12] K. REKTORYS A KOL.: *Přehled užití matematiky*. SNTL Praha 1968.
- [13] R. P. FEYNMAN, R. B. LEIGHTON, M. SANDS: *Feynmanove prednášky z fyziky 2*. Alfa Bratislava 1982, kap. 37.
- [14] J. OREAR: *Základy fyziky*. Alfa Bratislava 1977, str. 382.