**Lokalizovaný elektron, stojaté vlnění na struně a kvantování energie .**

RNDr. Aleš Lacina, CSc. Přírodovědecká fakulta UJEP, Brno

## 1.Úvod

Výuka základních partií kvantové mechaniky na střední škole využívá elementarizovaných postupů, které si kladou za cíl vyložit fundamentální ideje této discipliny nebo alespoň přístupným způsobem prezentovat některé její výsledky. Představa o diskrétním energiovém spektru prostorově ohraničených soustav, potřebná při výkladu vlastností atomu, se v poslední době zpravidla zavádí na základě analogie mezi stacionárními stavy mikroobjektu vázaného na úsečku a kmity homogenní struny.

Příspěvek připomíná, že ve své nejrozšířenější formulaci tato metoda výkladu nepopisuje objekt vázaný, ale volný. Poté jsou komentovány dvě nedávno publikované analýzy [1-3], [4,5] možnosti její modifikace na objekt vázaný. Dále se diskutuje vzájemný vztah těchto kritických rozborů a jejich korespondence s vysokoškolskou přípravou učitelů fyziky.

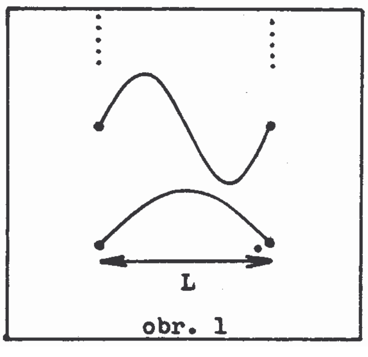
## 2. Standardní postup při výkladu kvantování energie

Postup založený na analogii "stacionární kvantový stav mikročástice vázané na úsečku - stojatá vlna na struně" je v učebnicové i vědecko populární literatuře natolik frekventovaný, že jej není třeba znovu podrobně uvádět. Na tomto místě pouze - pro zjednodušení pozdějších odkazů - připomeneme hlavní kroky jeho nejrozšířenější formulace.

Po prohlášení, že uvěznění mikroobjektu (obvykle se hovoří o elektronu) odpovídá upevnění struny na hranicích oblasti lokalizace, se konstatuje, že na úsečce délky $L$ může vzniknout jen některý z vlnových útvarů, nakreslených na obr. 1. Spojení této představy s de Broglieovým vztahem mezi vlnovou délkou $\lambda$ a impulsem $p$,

$$p = h/\lambda \tag{1}$$

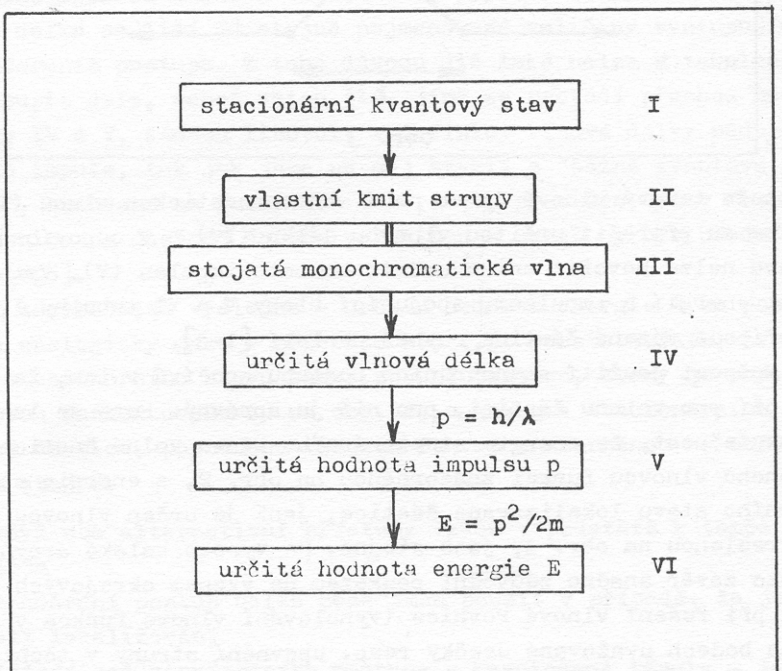
přivede ke kvantování impulsu, od nějž se použitím vztahu $E = p^2/2m$, dospěje k závěru, že energiové spektrum vyšetřované částice je diskrétní.



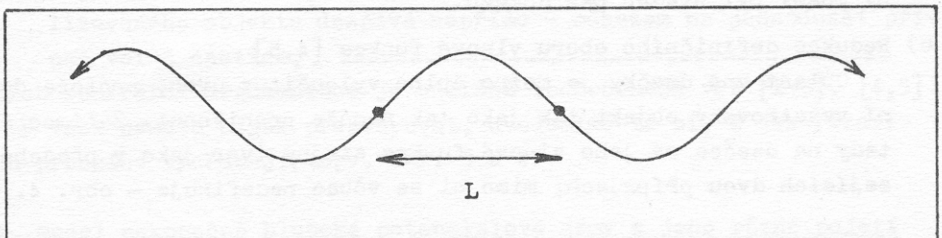

obr. 1

V tomto tvaru lze ovšem postup - navzdory všem komentářům o lokalizaci - použít jen v případě volné mikročástice, neboť de Broglieova vlna, jejíž vlnová délka λ vystupuje ve vztahu (1), je vlnovým útvarem vyplňujícím celý prostor x (-00 ,+00) [1-3]. Ke kvantování impulsu a energie částice zde došlo pouze díky tomu, že z původně spojitých spekter obou veličin byly (vynulováním její vlnové funkce v krajních bodech uvažované úsečky) vybrány jen některé hodnoty.

Logickou strukturu celého postupu shrnuje tabulka 1, v níž jsme pro větší přehlednost uvažovali jen jeden stacionární stav. Vybereme-li za něj stav energeticky nejchudší, bude mít odpovídající vlna tvar znázorněný na obr. 2.



tab. 1



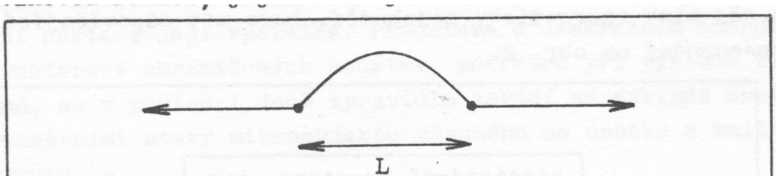
obr. 2

## 3.Modifikace standardního postupu na případ vázané částice

Abychom si mohli být jisti, že vyšetřovaná částice je skutečně vázána na úsečku, musíme s určitostí vědět, že nemůže být nalezena mimo ni. Tento požadavek lze ovšem formulovat různým způsobem.

a) Vynulováni pravděpodobnosti nalezení částice mimo oblast lokalizace [1-3]

Částice se mimo úsečku jistě nebude nacházet, bude-li zde její vlnová funkce nulová. V tom případě však již nebude její stacionární stav popsán vlnovou funkci nakreslenou na obr. 2, ale vlnovou funkci, jejíž tvar je znázorněn na obr. 3.



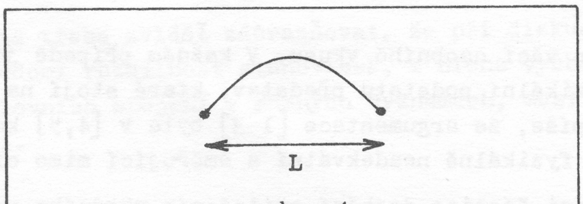
obr. 3

Protože takový vlnový útvar není monochromatickou vlnou (III), nelze mu přiřadit určitou vlnovou délku (IV) a v odpovídajícím stavu nelze hovořit ani o určité hodnotě impulsu (V). Vztah mezi energií a impulsem, spojující bloky V a VI tabulky 1, v případě vázaně částice rovněž neplatí [1-3].

Možnost použití standardního postupu spočívá v tom, že se vyloží pro volnou částici, pro niž je správný. Poté se lze opřít o skutečnost, že energie stacionárního stavu volné částice, popsaného vlnovou funkcí znázorněnou na obr. 2, a energie stacionárního stavu lokalizované částice, jenž je určen vlnovou funkcí nakreslenou na obr. 3, jsou stejné. Na vysokoškolské úrovni se tento závěr snadno zdůvodní poukazem na význam okrajových podmínek při řešení vlnové rovnice (vynulování vlnové funkce v krajních bodech uvažované úsečky resp. upevnění struny v těchto bodech). Při středoškolském výkladu by jej snad bylo možné učinit alespoň trochu přijatelným kvalitativní argumentací [3] nebo by musel být uveden bez důkazu.

b) Redukce definičního oboru vlnové funkce [4, 5]

Oblast vně úsečky je možno úplně vyloučit z úvah, protože do ní vyšetřovaný objekt tak jako tak nemůže proniknout. Zatímco tedy na úsečce má jeho vlnová funkce stejný tvar jako v předcházejících dvou případech, mimo ni se vůbec nefunguje - obr. 4.



obr. 4

Taková funkce je v celém svém definičním oboru řešením vlnové rovnice, což umožňuje – po poznámce, že zavedení vlnové délky je do jisté míry jen věcí definice [4,5] - o ní hovořit jako o monochromatické vlně (III) s určitou vlnovou délkou (IV). Je však třeba zdůraznit, že na tomto místě již nejde o faktickou, ale jen terminologickou shodu s tabulkou 1, protože takto definovaná vlnová délka se liší od stejně pojmenované veličiny vystupující ve standardním postupu. Z toho důvodu již také nelze v tabulce 1 postoupit dále, neboť vztah (1), jimž se provádí přechod mezi bloky IV a V, žádnou libovali v definici vlnové délky nedovoluje. Nadto impuls, tak jak jsme na něj zvykli z "běžné kvantové mechaniky", budované na intervalu $(-\infty,+\infty)$, přestává být v "kvantové mechanice na úsečce" dobrou veličinou a musel by být předefinován [4, 5].

K závěrečnému výsledku - určité hodnotě energie - se pak dospívá analogicky jako v přístupu a), t.j. konstatováním, že energie stacionárního stavu lokalizované částice, který je popsán vlnovou funkcí uvedenou na obr. 4, a energie stacionárního stavu volné částice, popsaného vlnovou funkci znázorněnou na obr. 2, jsou stejné.

I když oba alternativní přístupy vedou v podstatě k těmže obecným závěrům

(i) standardní postup nelze beze změn použít v případě, že je objekt lokalizován,

(ii) klíčový bod standardního postupu - kvantový impuls - je nutno v případě lokalizovaného objektu obejít,

(iii) k představě diskrétního energiového spektra se v případě lokalizovaného objektu dospívá nepřímo - odkazem na jednodušší případ volné částice,

jejich konkrétní argumentace je odlišná (podrobněji viz [1-3], [4, 5]. To by však nemělo nijak překvapovat, uvědomíme-li si, z jak rozdílných představ vycházejí (srv. obr. 3 a 4).

## **4.** Model nekonečně hluboké potenciálové jámy a jeho různá pojetí

Obě možnosti diskutované v předcházejícím oddílu jsou v rámci svých výchozích předpokladů dobře přijatelné a volba některých z nich je víceméně jen věci osobního vkusu. V každém případě je však zajímavé rozebrat fyzikální podstatu představ, které stojí na jejich počátku, a to tím spíše, že argumentace [1-3] byla v [4, 5] kategoricky odmítnuta jako fyzikálně neadekvátní a směřující mimo cíl.

K lokalizaci částice dochází přiložením vhodného vnějšího pole, konkrétně jejím uzavřením do potenciálové jámy. Příslušné výpočty se nejsnáze provádějí pro jámy pravoúhlé a proto se při polokvantitativních rozborech preferuje tento modelový potenciál.

a) "Fyzikální" pojetí modelu nekonečně hluboké potenciálové jámy E/V ≈ 0

Po výpočetní stránce je nejjednodušší případ, kdy výška potenciálových stěn V, ohraničujících jámu (resp. uvažovanou úseč- ku), je tak veliká ve i-rovnáni s energií E uvězněné částice, že pravděpodobnost jejího nalezeni vně. jámy nelze - v mezích přesnosti prováděných výpočtů - odlišit od nuly. (Jednoduchý rozbor ukazuje, že k tomu dojde, pokud je E!V~O; znaménko ~ vyjadřuje rovnost v mezích přesnosti prováděných výpočtů.) *V* takovém případě se pro stručnost 8. bez obav z nedorozumění běžně hovoří o (absolutně) neproniknutelných potenciálových stěnách, resp. nekonečně hluboké potenciálové jámě. Poznamenejme, že v drtivé většině učebnic kvantové mechaniky, užívaných při vysokoškolské přípravě středoškolských učitelů, (mj. i (6]) se nekonečně hluboká potenciálová jáma chápe právě takto a vlnová funkce vně ní se pokládá, bez počítání, rovna nule s odkazem na argument, kterým jsme uvedli oddíl 3a). Tato interpretace ji řadí mezi ostatní - realističtější - modely a umožňuje při jejím dalším studiu kombinovat matematickou jednoduchost popisu s fyzikální argumentaci.

b) "Matematické" pojetí modelu nekonečně hluboké potenciálové jámy V= ∞

Tvrzeni, že výška potenciálových stěn ohraničujících jámu je nekonečná, lze chápat i v matematickém slova smyslu (V = ∞**).** Na základě této interpretace se pak v [4, 5] dovozuje, že oblast vně jámy z hlediska uvažované částice vlastně neexistuje a proto musí být zcela ignorována (srv. oddíl 3b)). Takto chápaný model, který je, samozřejmě, fyzikálně nerealizovatelnou idealizací, nadto vyžaduje nahrazení "běžné kvantové mechaniky" její "úsečkovou verzí", což přináší i řadu dalších potíží [4, 5] v tomto pojetí se tak nekonečně hluboká potenciálová jáma stává umělým, značně komplikovaným matematickým problémem, velmi vzdáleným nejen od modelované reality, ale i od všech ostatních modelů užívaných v kvantové mechanice. Není jistě třeba zvlášť zdůrazňovat, že při diskusi, v níž si partneři neuvědomí rozdílnost stanovisek, z nichž vycházejí, a používají těchže slovních spojení v různých významech, musí nutně dojít k nedorozumění.

## 5. Závěr

Diskutovaná metoda výkladu kvantování energie je bezesporu duchu kvantové mechaniky blíže než Bohrův model atomu, který jí byl ve středoškolských učebnicích nahrazen. Středoškoláky však asi porozumění kvantové mechanice příliš nepřiblíží, nebude-li současně velice důkladně rozdiskutováno, o jaké vlnění zde jde, v jakém smyslu je se studovaným objektem spojeno a co se vlastně rozumí neustále opakovanými slovními spojeními "vlnové a korpuskulární chování (vlastnosti, rysy, charakter, podstata, ...)". Taková diskuse je ovšem časově nesmírně náročná a její zařazení by jistě nebylo možné řešit mechanickým přidáním do současných předimenzovaných osnov. Podle autorova názoru je však pro pochopení toho, oč v kvantové mechanice vlastně jde, podstatně důležitější než "odvození", v němž sice jeden vzorec navazuje na druhý, ale jehož vnitřní smysl zůstává nepochopen.

Máme-li na mysli jen samotné středoškoláky, pak, za těchto okolností, nemá vůbec smysl se přít, která z obou alternativ, rozebíraných v tomto příspěvku, je adekvátnější; a to tím spíše, že obě dospívají k prakticky témuž návrhu učebnicového postupu (viz poslední odstavec oddílu 3a).

Problém má ovšem i svoji druhou stránku: učitel bude tlumočit učebnicový text tím přesvědčivěji, čím hlouběji jej sám pochopí. A právě z tohoto d\'vodu má smysl a je třeba podrobně .analyzovat užívané elementarizované postupy a korelovat je s vysokoškolskou přípravou učitele. Není pochyb, že zde naše fakulta svým absolventům ještě mnoho dluží [7] a autor měl na mysli právě svoje svěřence – studenty učitelství fyziky – když se před lety do problematiky, jíž je věnován tento příspěvek, pustil.

Přestože se předcházející text úzkostlivě-snažil hovořit o obou komentovaných pojetích jako o stejně dobrých alternativách, je třeba závěrem přiznat, že autorovy sympatie patří jednoznačně variantě a). Podle jeho zkušenosti totiž ani aktivní středoškolští učitelé, ani studenti učitelství fyziky nejsou obeznámeni s matematickými základy kvantové mechaniky natolik, aby byli schopni argumentaci přístupu b) sledovat. Navíc se domnívá, že řada potíží, jež přináší umělá výlučnost takto chápaného modelu nekonečně hluboké potenciálové jámy (připomeňme alespoň nezbytnost předefinováni impulsu) je nejspíše zmate a mohla by zbytečně podlomit jejich důvěru v poznatky z kvantové mechaniky, které si odnesli z fakulty.

Literatura:


[1] Lacina A. ve sborníku ze semináře "Pedagogicko-fyzikální problematika kvantové fyziky", Luhačovice 1961, část 5, str. 29, red. M. Černohorský, M. Fojtíková, J. Janás.

[2] Lacina A.: PMFA XXVIII (19Sj) 342.

[3] Lacina A.: Eur. J. Phys. 6 (1985) 171.

[4] J Černý V., Pišút J., Prešnajder P.: PMFA XXX (1985) 226.

[5] Černý V., Pišút J., Prešnajder P.: Eur. J. Phys. 7 (1986) 134.

[6] Pišút J., Gomolčák L., Černý V.: Úvod do kvantovej mechaniky, Alfa, Bratislava 1983, 150.

[7] Pišút J.: MFvŠ 16 (1985/86) 47.