3 VLASTNOSTI RIEŠENÍ SCHRÖDINGEROVEJ ROVNICE

3.1 ÚVOD

V tejto kapitole si všimneme podrobnejšie niektoré všeobecné vlastnosti riešení časovej Schrödingerovej rovnice pre jedinú časticu v silovom poli opísanom potenciálnou energiou. Postupne sa budeme zaoberať s rovnicou kontinuity, s časovou závislosťou stredných hodnôt fyzikálnych veličín a s Ehrenfestovými vetami, ktoré ukazujú súvislosť medzi kvantovým a klasickým opisom pohybu častice v silovom poli. Napokon sa ešte raz pozrieme na stacionárne stavy a ukážeme, ako pomocou nich možno formálne opísať časový vývoj ľubovoľného stavu.

3.2 ROVNICA KONTINUITY

Ak poznáme stav, t. j. vlnovú funkciu $\Phi(\boldsymbol{r})$ uvažovanej sústavy v istom okamihu t_0, potom vieme pomocou Schrödingerovej rovnice predpovedať, v akom stave sa bude sústava nachádzať v ľubovoľnom neskoršom okamihu t. Stav v čase t je daný riešením rovnice.

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\boldsymbol{r},t)+V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{1}$$

so začiatočnou podmienkou

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\Phi(\boldsymbol{r}) \tag{1'}$$

Teraz si ukážeme, že riešenia rovnice (1), bez ohľadu na presný tvar začiatočnej podmienky, spĺňajú istý vzťah, ktorý je formálne úplne rovnaký ako rovnica kontinuity v hydrodynamike. Postupovať budeme čisto formálne. Rovnica komplexne združená k (1) je

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\boldsymbol{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi^*(\boldsymbol{r},t)+V(\boldsymbol{r})\psi^*(\boldsymbol{r},t) \tag{2}$$

Násobme (1) funkciou ψ^* a (2) funkciou ψ a odpočítajme druhú rovnicu od prvej. Pri úprave využijeme vzťah

$$\psi^*\Delta\psi-\psi\Delta\psi^*=\nabla.(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)$$

známy z vektorovej analýzy. Dostávame

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla.(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) \tag{3}$$

Výraz $\psi^*\psi$, ktorý má význam hustoty pravdepodobnosti výskytu častice v okolí bodu $\boldsymbol{r}$ v čase t označíme $\rho(\boldsymbol{r}, \mathrm{t})$. Ďalej zavedieme označenie

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t) = \frac{\hbar}{2\mathrm{i}m}(\psi^*(\boldsymbol{r},t)\nabla\psi(\boldsymbol{r},t) - \psi(\boldsymbol{r},t)\nabla\psi^*(\boldsymbol{r},t)) \tag{4}$$

a rovnicu (3) môžeme prepísať do tvaru

$$\frac{\partial\rho(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} + \nabla.\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t) = 0 \tag{5}$$

Rovnica (5) má analogický tvar ako rovnica kontinuity v hydrodynamike, nazývame ju tiež rovnicou kontinuity. Ako bude zrejmé z ďalšieho výkladu, fyzikálny zmysel tejto rovnice je analogický jej významu v hydrodynamike.

Ak stav sústavy v čase t_0 bol daný normovanou stavovou vlnovou funkciou $\Phi(\boldsymbol{r})$

$$\int\Phi^*(\boldsymbol{r})\Phi(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{6}$$

potom je prirodzené požadovať, aby pri časovom vývoji stavu bola celková pravdepodobnosť výskytu častice v celom priestore v každom čase t rovná jednej.

Riešenia SchR dané začiatočnou podmienkou (2) by teda mali spĺňať podmienku

$$\int\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = 1 \tag{7}$$

ktorá vyjadruje trvalú existenciu častice.

Riešenia SchR túto podmienku skutočne spĺňajú. Možno to jednoducho ukázať pomocou rovnice kontinuity.

Ak existuje integrál (7), potom hodnota výrazu $\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)$ klesá pre $r \to \infty$ rýchlejšie ako r^{-3}. Predpokladajme ďalej, že aj výrazy typu $\psi^*(\partial\psi/\partial x)\psi$. klesajú pri $r \to \infty$ rýchlejšie ako r^{-3}. Potom z rovnice kontinuity vyplýva

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\int_V \rho(\boldsymbol{r},t)\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = -\int_V \nabla.\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = -\int_S \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t).\mathrm{d}\boldsymbol{S}$$

kde $\boldsymbol{S}$ je plocha, ohraničujúca objem V. V limite $V \to \infty$ plošný integrál v dôsledku vyslovených predpokladov konverguje k nule. Dostaneme teda (pri integrovaní cez celý priestor)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\int_V \rho(\boldsymbol{r},t)\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = 0 \tag{8}$$

Integrál v (7) je nezávislý na čase, a pretože spĺňa začiatočnú podmienku (6), je vzťah (7) splnený. Platnosť podmienky (7) je v skutočnosti veľmi dôležitá. Ukazuje konzistentnosť SchR ako rovnice určujúcej časový vývoj stavov s pravdepodobnostnou interpretáciou vlnovej funkcie ; podmienka (8) je vlastne zákonom zachovania celkovej pravdepodobnosti. Rovnica kontinuity má význam zákona zachovania pravdepodobnosti v diferenciálnom tvare.

Na záver článku urobíme ešte tri poznámky k rovnici kontinuity.

1. Je užitočné si všimnúť, že rovnica kontinuity (5) platí nezávisle od tvaru potenciálu za predpokladu, že potenciál je reálny. Pre komplexný potenciál $V = \mathrm{Re}\,V + \mathrm{i}\,\mathrm{Im}\,V$ dostaneme po podobných úpravách ako pri odvodení (5) rovnicu kontinuity v modifikovanom tvare

$$\frac{\partial}{\partial x}\rho(\boldsymbol{r},t)+\nabla.\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)=\rho(\boldsymbol{r},t)\frac{2\,\mathrm{Im}V}{\hbar} \tag{9}$$

kde $\rho = \psi^*\psi$ a $\boldsymbol{j}$ je dané rovnicou (4). Ak potenciál V má nenulovú imaginárnu časť, tak pravá strana (9) ukazuje, že v miestach, kde je $\mathrm{Im}\,V > 0$, vznikajú nové častice. Podobne v miestach, kde $\mathrm{Im}\,V < 0$ sú častice pohlcované. Tento druhý prípad sa používa pri fenomenologickom opise rozptylu častíc na jadrách, keď jadro pohlcuje dopadajúce častice. Po pohltení vznikajú komplikované jadrové reakcie, ale dopadajúca častica sa už nemusí objaviť; z hľadiska pružného rozptylu je vtedy „stratená“.

2. Rovnicu (8) možno odvodiť aj bez detailných predpokladov o operátore H. Pre jej platnosť stačí, aby operátor H bol hermitovský. Skutočne, zapíšme SchR v tvare

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\mathsf{H}\psi \tag{10}$$

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=(\mathsf{H}\psi)^* \tag{11}$$

Násobme (10) ψ^* a (11) zase ψ a odpočítajme druhú od prvej. Po integrovaní cez celý priestor dostaneme :

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\psi^*\psi\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\frac{1}{i\hbar}\int[\psi^*\mathsf{H}\psi-(\mathsf{H}\psi)^*\psi]\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

a pre hermitovský operátor H sa pravá strana rovná nule.

3. Ak vlnová funkcia ψ opisuje časticu s nábojom e, zavádzame hustotu náboja $\rho'(\boldsymbol{r}, t)$ a hustotu prúdu náboja $\boldsymbol{j}'(\boldsymbol{r}, t)$ vzťahmi

$$\rho'(\boldsymbol{r}, t) = e\rho(\boldsymbol{r}, t) = e|\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2$$

$$\boldsymbol{j}'(\boldsymbol{r}, t) = e\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t) = \frac{e\hbar}{2\mathrm{i}m}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)$$

Pre tieto veličiny platí tiež rovnica kontinuity

$$\frac{\partial\rho'}{\partial t} + \nabla.\boldsymbol{j}' = 0$$

ktorá vyjadruje zákon zachovania elektrického náboja.

3.3 ČASOVÁ ZÁVISLOSŤ STREDNÝCH HODNÔT

Stredná hodnota veličiny F, ktorej je priradený operátor F je v stave opísanom v čase t vlnovou funkciou $\psi(\boldsymbol{r}, t)$daná vzťahom

$$\overline{F}(t) = \int \psi^*(\boldsymbol{r}, t)\mathsf{F}\,\psi(\boldsymbol{r}, t)\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{1}$$

kde sme explicitne zapísali fakt, že stredná hodnota veličiny F bude vo všeobecnosti závisieť od času.

V niektorých prípadoch môže byť užitočné vedieť vypočítať pre daný stav $\psi^*(\boldsymbol{r}, t)$ priamo deriváciu funkcie $\overline{F}(t)$ podľa času bez toho, aby sme najprv počítali funkciu $\overline{F}(t)$ Ak operátor F nezávisí explicitne od času, dostaneme postupne po využití SchR:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{F}(t) = \int\left[\frac{\partial\psi^*(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}\mathsf{F}\,\psi(\boldsymbol{r},t) + \psi^*(\boldsymbol{r},t)\mathsf{F}\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{F}(t) = \int\psi^*(\boldsymbol{r},t)\left\{\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\mathsf{FH}-\mathsf{HF}]\right\}\psi(\boldsymbol{r},t)\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

Označme operátor v poslednom integráli[63]

$$\dot{\mathsf{F}} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\mathsf{F},\mathsf{H}] = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\mathsf{FH}-\mathsf{HF}) \tag{2}$$

V označení podľa (2) máme

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{F}(t) = \int\psi^*(\boldsymbol{r},t)\dot{\mathsf{F}}\,\psi(\boldsymbol{r},t)\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{3}$$

Poznamenajme, že použité označenie je z hľadiska princípu korešpondencie veľmi prirodzené. V klasickom prípade časová derivácia veličiny F má opäť význam

[63] Zdôraznime tu, že $\dot{\mathsf{F}}$ je operátor priradený časovej derivácii veličiny F a nie derivácia operátora F.

nejakej fyzikálnej veličiny G. Ako príklad uveďme prípad jednej častice a veličiny $\boldsymbol{r}$ (poloha častice). Časová derivácia má význam rýchlosti $\boldsymbol{v}$ častice.

Ak poznáme operátor F príslušný veličine F a hľadáme, aký operátor prislúcha klasickej veličine $\dot{F}$, potom je z hľadiska princípu korešpondencie prirodzené priradiť veličine $\dot{F}$ taký operátor $\dot{\mathsf{F}}$, aby platil vzťah

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{F}(t) = \overline{\dot{\mathsf{F}}}$$

resp. s explicitným vypísaním definície stredných hodnôt

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int \psi^*(\boldsymbol{r},t)\mathsf{F}\,\psi(\boldsymbol{r},t)\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \int \psi^*(\boldsymbol{r},t)\dot{\mathsf{F}}\,\psi(\boldsymbol{r},t)\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{4}$$

Definícia operátora $\dot{\mathsf{F}}$ pomocou vzťahu (2) zabezpečuje splnenie vzťahu (4), požadovaného princípom korešpondencie.

Napríklad pre operátor priradený k časovej derivácii súradnice máme podľa vzťahu (2)

$$\dot{\mathsf{x}} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\mathsf{x},\mathsf{H}] \tag{5a}$$

a podobne pre operátor priradený k časovej derivácii x -súradnice hybnosti máme

$$\dot{\mathsf{p}}_x = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\mathsf{p}_x,\mathsf{H}] \tag{5b}$$

Tým sme sa ale dostali do zaujímavej situácie v otázke vzťahu klasickej a kvantovej mechaniky. Ak totiž v klasickej mechanike opisujeme pohyb jedinej častice v silovom poli opísanom potenciálnou energiou $V(\boldsymbol{r})$ a ak za premenné charakterizujúce klasický stav častice vyberieme $\boldsymbol{r}$ a $\boldsymbol{p}$, potom máme klasické pohybové rovnice

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{m}p_x \tag{6a}$$

$$\frac{\mathrm{d}p_x}{\mathrm{d}t} = F_x = -\frac{\partial V(r)}{\partial x} \tag{6b}$$

Pýtame sa, prirodzene, na to, aký je súvis pohybových rovníc (6) a vzťahov (5) platných pre operátory v kvantovej mechanike.[64] Ako uvidíme v nasledujúcom

[64] Súvis medzi vzťahmi (5) a (6) musíme overiť i preto, lebo môže vzniknúť napríklad otázka typu ako „správne“ definovať povedzme operátor rýchlosti častice. V našom doterajšom výklade sme používali metódu, pri ktorej najprv vyjadríme klasickú veličinu (rýchlosť) pomocou klasických veličín súradnice a hybnosti a potom v tomto vyjadrení nahradíme x a p príslušnými operátormi (porovnaj či. 2.12). Takémuto postupu odpovedá definícia operátora rýchlosti podľa odpovedajúceho vzťahu (6a). Vzťah (5a) predstavuje alternatívnu definíciu. Ako uvidíme v nasledujúcom článku, obe definície sú ekvivalentné.

článku, tento súvis je veľmi tesný a vzťahy (5), ako sa ukáže, budú vlastne prepisom klasických vzťahov (6) do jazyka operátorov. Fyzikálne má toto tvrdenie, pre náš jednoduchý príklad častice v silovom poli, jasnú fyzikálnu interpretáciu obsiahnutú v *Ehrenfestových vetách* (článok 3.4).

V niektorých prípadoch môže operátor F závisieť explicitne od času. Po minimálnych modifikáciách predchádzajúceho postupu dostaneme v tomto prípade

$$\dot{\mathsf{F}} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\mathsf{F},\mathsf{H}] + \frac{\partial}{\partial t}\mathsf{F} \tag{7}$$

Ak sa v klasickej mechanike pri pohybe sústavy nemení hodnota určitej veličiny, potom túto veličinu nazývame integrálom pohybu. V kvantovej mechanike je definícia analogická: ak sa *stredná hodnota* veličiny F nemení pri časovom vývoji ľubovoľného stavu sústavy, potom veličinu F nazývame integrálom pohybu. Vzhľadom na rovnicu (3) je podmienkou pre to, aby veličina F bola integrálom pohybu splnenie vzťahu

$$\dot{\mathsf{F}} = 0$$

Ak sa obmedzíme iba na také veličiny, ktorých operátory F nezávisia explicitne od času, potom veličina F je integrálom pohybu práve vtedy, ak platí

$$[\mathsf{F}, \mathsf{H}] = 0$$

teda keď operátor F priradený tejto veličine komutuje s hamiltoniánom H.

Poznámka: Rovnica (7) pripomína pohybovú rovnicu klasickej mechaniky, zapísanú pomocou Poissonových zátvoriek. Ak je sústava v klasickej mechanike opísaná zovšeobecnenými súradnicami $q = (q_1, q_2, ..., q_N)$ a príslušnými kanonicky združenými hybnosťami $p = (p_1, p_2, ..., p_N)$, tak pre časovú zmenu ľubovoľnej fyzikálnej veličiny $F = F(q, p, t)$ platí:[65]

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = \{F,H\} + \frac{\partial F}{\partial t}$$

kde

$$\{F,H\} = \sum_{k=1}^{N}\left(\frac{\partial F}{\partial q_k}\frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial F}{\partial p_k}\frac{\partial H}{\partial q_k}\right)$$

Pri prechode od klasickej mechaniky k mechanike kvantovej treba zameniť klasickú Poissonovu zátvorku za komutátor operátorov podľa vzťahu

$$\{F,H\} \to \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[F,H]$$

[65] Pozri napr. Landau, L. D. – Lifšic, E. M.: Mechanika. Moskva 1965.

Táto analógia nie je len formálna, ale predstavuje asi najhlbší súvis medzi klasickou a kvantovou mechanikou.[66]

3.4 EHRENFESTOVE VETY

V klasickej mechanike platia pre jednu časticu, ktorá sa pohybuje vo vonkajšom poli opísanom potenciálnou energiou $V(\boldsymbol{r})$, Newtonove rovnice

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} = \frac{\boldsymbol{p}}{m} \tag{1a}$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = -\nabla V(\boldsymbol{r}) \tag{1b}$$

Ehrenfestove vety tvrdia, že v kvantovej mechanike platia rovnice (1) pre stredné hodnoty príslušných veličín

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{\boldsymbol{r}} = \frac{\bar{\boldsymbol{p}}}{m} \tag{2a}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{\boldsymbol{p}} = -\overline{\nabla V(\boldsymbol{r})} \tag{2b}$$

Dokážeme teraz rovnicu (2a) pre súradnicu x. Podľa predchádzajúceho článku platí:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{x} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\mathsf{xH} - \mathsf{Hx}]} \tag{3}$$

Výraz v hranatej zátvorke je operátor. Aby sme ho upravili na prehľadnejší tvar, aplikujeme ho na ľubovoľnú funkciu $\varphi(\boldsymbol{r})$. Za H dosadíme známy výraz

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r})$$

a využijeme jednoduché vzťahy

$$xV(\boldsymbol{r}) - V(\boldsymbol{r})x = 0$$

$$x\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2} - \frac{\partial^2(x\varphi)}{\partial y^2} = x\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} - \frac{\partial^2(x\varphi)}{\partial z^2} = 0$$

[66] Na podrobnejšie štúdium odporúčame IV. kap. Diracovej monografie [14].

$$x\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}-\frac{\partial^2(x\varphi)}{\partial x^2}=-2\frac{\partial\varphi}{\partial x}$$

Dostaneme:

$$(\mathsf{xH}-\mathsf{Hx})\varphi(x)=\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial\varphi}{\partial x}=\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\mathsf{p}_x\varphi(x)$$

Pretože táto rovnica platí pre každú funkciu $\varphi(\boldsymbol{r})$, môžeme ju prepísať v operátorovom tvare ako

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\mathsf{xH}-\mathsf{Hx})\varphi(x)=\frac{\mathsf{p}_x}{m}$$

Po dosadení (4) do (3) dostaneme rovnicu (2a) pre zložky x. Pri dokazovaní rovnice (2b) postupujeme analogicky.

Vyjdeme zo vzťahu (vyplývajúceho z článku 3.3)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\bar{p}_x)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\mathsf{p}_x\mathsf{H}-\mathsf{H}\mathsf{p}_x]} \tag{5}$$

Operátor v hranatej zátvorke aplikujeme potom na funkciu $\varphi(\boldsymbol{r})$ a postupne dostaneme:

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\mathsf{p}_x\mathsf{H}-\mathsf{H}\mathsf{p}_x]\varphi(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\mathsf{p}_xV(\boldsymbol{r})-V(\boldsymbol{r})\mathsf{p}_x]\varphi(\boldsymbol{r})=$$
$$=-\frac{\partial}{\partial x}[V(\boldsymbol{r})\varphi(\boldsymbol{r})]+V(\boldsymbol{r})\frac{\partial}{\partial x}\varphi(\boldsymbol{r})=-\frac{\partial V(\boldsymbol{r})}{\partial x}\varphi(\boldsymbol{r})$$

Odtiaľ vyplýva:

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\mathsf{p}_x\mathsf{H}-\mathsf{H}\mathsf{p}_x]=-\frac{\partial V(\boldsymbol{r})}{\partial x}$$

a po dosadení do (5) dostaneme rovnicu (2b) pre p_x, čo sme chceli dokázať. Odvodenie vzťahov (2a) a (2b) pre zostávajúce zložky $\bar{\boldsymbol{r}}$ a $\bar{\boldsymbol{p}}$ je úplne identické s predchádzajúcim postupom a nebudeme ho uvádzať.

Fyzikálny význam Ehrenfestových viet je v nasledujúcom. Pre stredné hodnoty

$$\bar{x}(t)=\int\varphi^*(\boldsymbol{r},t)\mathsf{x}\varphi(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$
$$\bar{p}_x(t)=\int\varphi^*(\boldsymbol{r},t)\mathsf{p}_x\varphi(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

platia rovnice (2a) a (2b). Prvá z nich vraví, že časová zmena $\bar{x}(t)$ je rovná strednej hodnote hybnosti častice $\bar{p}_x(t)$ delenej m, čo odpovedá strednej hodnote rýchlosti. Pre časovú deriváciu strednej hodnoty hybnosti dostaneme podľa (2b)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{\boldsymbol{p}(t)} = \int \varphi^*(\boldsymbol{r},t)(-\nabla V(\boldsymbol{r}))\varphi(\boldsymbol{r},t)\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{7}$$

kde na pravej strane máme hodnotu x – zložky sily pôsobiacej na časticu. Takto Ehrenfestove vety ukazujú, že stredné hodnoty fyzikálnych veličín v kvantovej mechanike spĺňajú vzťahy, ktoré v klasickom prípade spĺňajú samotné fyzikálne veličiny. Tu vidíme dôvod, prečo naše jednoduché numerické (a zväčša iba rádové) odhady veličín v atómovej fyzike, ktoré sme robili v prvej kapitole, boli pomerne úspešné, hoci sme nepoužívali úplný kvantovomechanický aparát.[67]

Pri Ehrenfestových vetách si ešte treba uvedomiť, že vzťahy ako (7) vravia iba o tom, ako sa správajú stredné hodnoty fyzikálnych veličín a nehovoria o tom, ako sa mení s časom tvar vlnového balíka priradeného stavu častice.

3.5 STACIONÁRNE STAVY

Spomedzi všetkých stavov sústavy význačné miesto z hľadiska časového vývoja zaujímajú vlastné stavy operátora energie[68] H. Označme vlnové funkcie prislúchajúce vlastným stavom H ako $\Phi_n(\boldsymbol{r})$. Platí teda (predpokladáme diskrétne spektrum):

$$\mathsf{H}\Phi_n(\boldsymbol{r}) = E_n\Phi_n(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

Hľadajme teraz riešenia SchR

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_n(\boldsymbol{r},t) = \mathsf{H}\psi_n(\boldsymbol{r},t) \tag{2}$$

ktoré spĺňajú začiatočné podmienky

$$\psi_n(\boldsymbol{r}, t = 0) = \Phi_n(\boldsymbol{r}) \tag{3}$$

Funkcia $\psi_n(\boldsymbol{r}, t)$ je vzhľadom na premennú t riešením lineárnej diferenciálnej rovnice (2) prvého rádu. Preto je rovnicou (1) a začiatočnou podmienkou (3) určená jednoznačne. Ľahko sa presvedčíme o tom, že

$$\psi_n(\boldsymbol{r}, t) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n t}\,\Phi_n(\boldsymbol{r})$$

[67] Hlbší pohľad na súvis medzi kvantovou a klasickou mechanikou vidno z kváziklasického priblíženia k pohybovým rovniciam kvantovej mechaniky. Pozri napr. Davydov A. S.: Kvantová mechanika, SPN, Praha 1978.

[68] Predpokladáme, že H nezávisí explicitne od času.

je hľadaným riešením. Vidíme, že časová závislosť stacionárneho stavu (vlastného stavu H) je veľmi jednoduchá a pritom taká, že počas časového vývoja stacionárny stav ostáva vlastným stavom H prislúchajúcim tej istej hodnote E_n ako v čase $t = 0$. Skutočne, v každom čase t je splnený vzťah

$$\mathsf{H}\,\psi_n(\boldsymbol{r}, t) = E_n\,\psi_n(\boldsymbol{r}, t)$$

Teda energia sústavy opísanej vlnovou funkciou $\psi_n(\boldsymbol{r}, t)$ má stále „ostrú“ hodnotu rovnú E_n.

Platí aj opačné tvrdenie. Ak nejaký stav $\psi_n(\boldsymbol{r}, t)$ má jednoduchú časovú závislosť danú vzťahom

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}\,\Phi(\boldsymbol{r})$$

a zároveň je riešením Schrödingerovej rovnice (2), potom $\Phi(\boldsymbol{r})$ je vlastným stavom hamiltoniánu. Skutočne, vlnová funkcia musí spĺňať SchR:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_n(\boldsymbol{r},t) = \mathsf{H}\,\psi_n(\boldsymbol{r},t)$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}\Phi(\boldsymbol{r})) = \mathsf{H}(\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}\Phi(\boldsymbol{r}))$$

$$E\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}\Phi(\boldsymbol{r}) = \mathsf{H}(\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}\Phi(\boldsymbol{r}))$$

$$E\Phi(\boldsymbol{r}, t) = \mathsf{H}\Phi(\boldsymbol{r}, t)$$

teda $\Phi(\boldsymbol{r})$ je skutočne vlastným stavom Hamiltoniánu.[69]

Pomocou stacionárnych stavov možno ľahko (formálne) nájsť časový vývoj ľubovoľného stavu, t. j. nájsť riešenie SchR

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_n(\boldsymbol{r},t) = \mathsf{H}\,\psi_n(\boldsymbol{r},t) \tag{4}$$

spĺňajúce ľubovoľnú okrajovú podmienku

$$\psi_n(\boldsymbol{r}, t_0 = 0) = \Phi(\boldsymbol{r}) \tag{5}$$

Ak predpokladáme, že stacionárne stavy $\Phi_n(\boldsymbol{r})$ tvoria úplný systém stavov, potom funkciu $\Phi(\boldsymbol{r})$ môžeme rozložiť do radu

$$\Phi(\boldsymbol{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Phi_n(\boldsymbol{r}) \tag{6}$$

[69] Tu vidíme dôvod, prečo sa nám v prvej kapitole podarilo nájsť možné diskrétne hladiny sústav pomocou mechanickej analógie s harmonickými kmitmi, ktorých časová závislosť bola daná jedinou frekvenciou ω a bola tvaru exp $(-\mathrm{i}\omega t)$.

kde koeficienty c_n sú dané vzťahom

$$c_n = \int \Phi_n^*(\boldsymbol{r},t)\Phi(\boldsymbol{r},t)\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{7}$$

Časový vývoj stavu $\Phi(\boldsymbol{r})$ potom nájdenie pomocou princípu superpozície. Ľahko sa možno presvedčiť o tom, že funkcia

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \sum_{n=1}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n t} c_n \Phi_n(\boldsymbol{r}) \tag{8}$$

je hľadaným (pritom jednoznačným) riešením rovnice (4) so začiatočnou podmienkou (5).

Pomocou rovníc (7) a (8) môžeme dostať ešte jedno veľmi dôležité vyjadrenie funkcie $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ opisujúcej stavy sústavy v čase t pomocou stavu $\psi_n(\boldsymbol{r}, t_0 = 0) = \Phi(\boldsymbol{r})$. Ak do (8) dosadíme koeficienty c_n vyjadrené pomocou (7), dostaneme

$$\psi_n(\boldsymbol{r},t) = \mathrm{i}\int G(\boldsymbol{r},t;\boldsymbol{r}',t_0)\psi_n(\boldsymbol{r}',t_0)\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{9}$$

kde sme označili

$$G(\boldsymbol{r},t;\boldsymbol{r}',t') = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{\mathrm{i}} \sum_{n=0}^{N} \Phi_n(\boldsymbol{r})\Phi_n^*(\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n(t-t')/\hbar}\Theta(t-t') \tag{10}$$

Postupom medzi rovnicami (5) a (8) sme dokázali vzťahy (9), (10) pre špeciálny prípad $t_0 = 0$, ale zovšeobecnenie na situáciu, v ktorej je začiatočná podmienka daná vzťahom $\psi_n(\boldsymbol{r}, t_0) = \Phi(\boldsymbol{r})$ pre $t_0 \neq 0$, nepredstavuje ťažkosti a prenecháme ho čitateľovi. Na pravej strane v rovniciach (9) a (10) sa objavuje faktor i, ktorý sa navzájom kompenzuje, jeho prítomnosť je len otázkou konvencie. Vo vzťahu (10) sa okrem toho, čo získame dosadením zo vzťahu (8) vyskytuje faktor $\Theta(t - t')$, čo je tzv. Θ-funkcia definovaná vzťahom

$$\Theta(t-t') = \left\langle \begin{array}{ll} 1 \quad \text{pre} & t > t' \\ 0 \quad \text{pre} & t \le t' \end{array} \right. \tag{11}$$

Význam zavedenia Θ-funkcie do vzťahu (10) bude zrejmý až neskôr.

Fyzikálny význam (9) je zaujímavý. Ak si totiž predstavíme, že v čase t_0 je stav opísaný vlnovou funkciou lokalizovanou veľmi silne v okolí bodu $\boldsymbol{r}_0$; potom v čase t bude stav častice opísaný vlnovou funkciou i$G(\boldsymbol{r}, t; r_0, t_0)$. Takto je i$G(\boldsymbol{r}, t; r_0, t_0)$ vlnou, ktorá vznikla z „bodového zdroja“ v čase t_0 v mieste $\boldsymbol{r}_0$. Integrál v (9) nám hovorí, že vlnová funkcia v čase t je superpozíciou príspevkov od jednotlivých „bodových zdrojov“ v čase t_0. V istom zmysle je vzťah (9) vyjadrením kvantovo-mechanického analógu Huygensovho princípu, známeho z optiky a všeobecne z teórie šírenia vlnových procesov. Výraz i$G(\boldsymbol{r}, t; \boldsymbol{r}', t')$ sa nazýva propagátorom, alebo Greenovou funkciou a jeho relativistické zovšeobecnenia hrajú veľmi dôležitú úlohu v kvantovej teórii polí, vo fyzike elementárnych častíc i v teórii tuhých látok. V tejto učebnici sa s propagátormi $G(\boldsymbol{r}, t; \boldsymbol{r}', t')$ ešte stretneme v 16. kapitole.

3.6 PRÍKLADY A PROBLÉMY

1. Nájdite hustotu prúdu pravdepodobnosti pre rovinnú vlnu normovanú na konečný objem.

2. Ukážte, že v stacionárnom stave je stredná hodnota veličiny reprezentovanej operátorom nezávislým explicitne od času, konštantná (t. j. nezávislá od času).

3. Častica sa pohybuje v poli opísanom potenciálom V(r). V stacionárnom stave je časová derivácia strednej hodnoty ľubovoľnej, od času explicitne nezávislej veličiny nulová. Využite

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{(\boldsymbol{r}.\boldsymbol{p})} = 0 \tag{1}$$

a odvoďte odtiaľ vzťah

$$2\overline{T} = \overline{(\boldsymbol{r}.\nabla V(r))} \tag{2}$$

kde T označuje strednú hodnotu kinetickej energie častice. Ako môžeme prepísať (2), ak $V(\boldsymbol{r}) = Cr^n$?

4. Ukážte, že ak vlnová funkcia $\psi(\boldsymbol{r}, t)$, ktorá je riešením SchR, je vlastnou funkciou operátora A v čase $t = t_0$ a operátor A nezávisí explicitne od času a komutuje s hamiltoniánom, potom je $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ vlastnou funkciou operátora A v ľubovoľnom čase a príslušná vlastná hodnota sa s časom nemení.