Schrödingerova rovnice

1 de Broglieovy vlny a uhodnutí Schrödingerovy rovnice

- základní vztahy pro de Broglieovy vlny

$$\bar{p} = \hbar \bar{k} \qquad E = \hbar\omega \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 10^{-34}\,\mathrm{Js}$$ – redukovaná Planckova konstanta

$E, \bar{p}$ – charakteristiky částice $\quad \omega, \bar{k}$ – charakteristiky příslušné vlny

– de Broglieova vlnová délka pro volnou částici

vlnová délka: $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ $\qquad$ energie volné částice: $E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$

$$\rightarrow \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad \lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE}} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

- difrakční experimenty potvrzující vlnovou povahu částic

– Davisson - Germer (1927) – difrakce elektronů na krystalu Ni, $E \approx 50\,\mathrm{eV}$, $\lambda \approx 0.17\,\mathrm{nm}$

– dvouštěrbinové experimenty s hmotnými objekty

skupina A. Zeilingera: neutrony (1988), molekuly (1999)

Tonomura et al. (1987): difrakční obrázek složený z individuálních dopadů el.

- sestavení rovnice pro de Broglieovy vlny a zobecnění na rovnici Schrödingerovu

– obvyklá vlnová rovnice pro skalární vlny s fázovou rychlostí c (1D případ)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \qquad \text{řešení } u = C e^{i(kx-\omega t)} \rightarrow \quad \text{disperzní relace } \omega = ck$$

– de Broglieovy vlny mají kvadratickou disperzní relaci, nikoli lineární

$$\hbar\omega = E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \rightarrow \quad \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

– částice šířící se ve směru osy x je popsána vlnovou funkcí:

$$\psi(x,t) = C e^{i(kx-\omega t)} = C e^{i\left(kx - \frac{\hbar}{2m}k^2 t\right)} = C e^{ikx} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hbar^2 k^2}{2m}t}$$

sestavíme vlnovou rovnici, jejímž řešením bude to to $\psi(x,t)$

srovnání derivací:

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) &= -k^2\psi(x,t) \\ \frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) &= -i\frac{\hbar}{2m}k^2\psi(x,t) \end{aligned}\right\}$$

nestacionární Schrödingerova rovnice pro volnou částici

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi$$

druhá derivace podle času se nehodí: $\quad \frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi(x,t) = -\left(\frac{\hbar}{2m}\right)^2 k^4 \psi(x,t)$

– doplnění potenciálu

rovinná vlna ↓

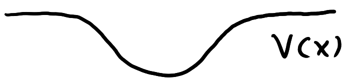
operace $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ vynásobí rovinnou vlnu kinetickou energií částice $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi$

přidáme ψ vynásobené potenciální energií a získáme kompletní Schr. r. v 1D

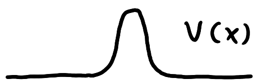
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) + V(x,t)\,\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)$$

$V(x,t)$ je (obecně časově závislý) potenciál (= energie, není to přímo elst. potenciál)

potenciálová jáma



potenciálová bariéra



– zobecnění na 3D případ (v analogii s vln. rovnicí použít laplacián $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$)

→ nestacionární Schrödingerova rovnice

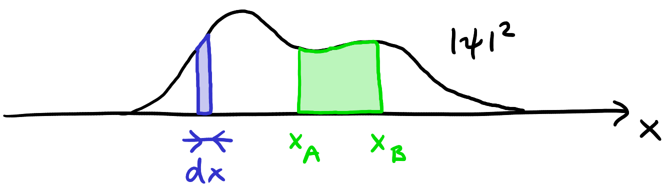
$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec r,t)}_{\text{člen extrahující kinetickou energii}} + \underbrace{V(\vec r,t)\,\psi(\vec r,t)}_{\text{násobení potenciální energií v daném místě}} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec r,t)$$

2 Pravděpodobnostní interpretace vlnové funkce

Vlnová funkce $\psi(\vec r,t)$ není spojena s žádným silovým polem jako třeba veličiny popisující EM vlnu, ani se nedá spojovat s rozložením částice v prostoru (ve smyslu fragmentace nebo/rozprostření). Částice pořád chápeme jako bodové, $\psi(\vec r,t)$ ovšem určuje pravděpodobnost jejich nalezení v různých místech.

- Max Born: $|\psi|^2$ je hustota pravděpodobnosti výskytu částice

objasnění pro 1D:



P (nalezení v intervalu $[x, x+dx]$) $= |\psi(x,t)|^2 dx$ (pro $dx \to 0$) – definice hust. pr.

P (nalezení v intervalu $[x_A, x_B]$) = součet elementárních příspěvků typu $|\psi|^2 dx$

$$= \int_{x_A}^{x_B} |\psi(x,t)|^2\, dx$$

ve 3D analogicky: P (nalezení částice v objemu V) $= \iiint_V |\psi(\vec r,t)|^2\, d^3\vec r$

← nějaká konkrétní oblast

zjevný požadavek: P(částice je někde mezi $-\infty$ a $+\infty$) = 1

$$\rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1$$ pro libovolný čas t – normovanost vlnové funkce

- střední poloha $\langle x \rangle$

  motivace – průměrné číslo, které padne na hrací kostce

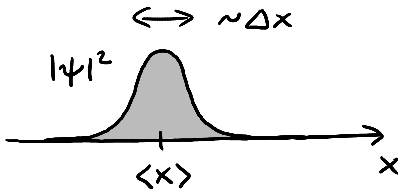
  $$\langle x \rangle = \frac{1}{6}\,1 + \frac{1}{6}\,2 + \frac{1}{6}\,3 + \frac{1}{6}\,4 + \frac{1}{6}\,5 + \frac{1}{6}\,6 = 3.5$$

  pravděpodobnosti jednotlivých výsledků vystupují jako váhy ve váženém průměru

  aplikace na náš spojitý případ $$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \underset{\text{hodnota}}{x}\ \underbrace{|\psi(x,t)|^2 dx}_{\text{pravděpodobnost = váha}}$$

  Podle tohoto vzoru lze zkonstruovat stř. hodnotu libovolné veličiny závislé na poloze.

- neurčitost polohy Δx – střední kvadratická odchylka od střední polohy



$$\Delta x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} (x - \langle x \rangle)^2\, |\psi(x,t)|^2 dx}$$

3 Stacionární stavy a stacionární Schrödingerova rovnice

- potenciál nezávislý na čase umožňuje nalézt řešení Schrödingerovy rovnice ve tvaru se separovanou časovou závislostí $\psi(\vec{r},t) = \Psi(\vec{r})\,\phi(t)$ (metoda separace proměnných)

  dosazení (derivace ve Sch.r. si všímají jen příslušné komponenty řešení):

  $$\phi(t)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla^2 \Psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\,\Psi(\vec{r})\,\phi(t) = \Psi(\vec{r})\, i\hbar \frac{d}{dt}\phi(t)$$

  podělíme $\Psi\phi$ (později bude opět napraveno vynásobením)

  $$\frac{1}{\Psi(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \Psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\,\Psi(\vec{r})\right] = \frac{1}{\phi(t)}\, i\hbar \frac{d}{dt}\phi(t)$$

  rovnice má tvar funkce $\vec{r}$ = funkce t

  → lze splnit jen konstantní funkcí, konstantu označíme E a získáme dvě diferenciální rovnice svázané jen skrze konstantu E

1) stacionární Schrödingerova rovnice $$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \Psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\,\Psi(\vec{r}) = E\,\Psi(\vec{r})$$

2) rovnice určující časový vývoj stacionárního stavu

$$i\hbar \frac{d}{dt}\phi(t) = E\,\phi(t) \quad \rightarrow \quad \phi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

výsledné řešení Sch.r. $\psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ popisuje tzv. stacionární stav
též označován jako vlastní stav

- poznámky:
  - konstanta E je reálná (viz doplněk na konci)
  - konstanta E má význam celkové energie stacionárního stavu
  - hustota pravděpodobnosti $|\psi|^2$ stacionárního stavu je nezávislá na čase a rovna $|\psi|^2$

ověření: $|\psi|^2 = [\psi(\vec{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}]^* [\psi(\vec{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}] = |\psi(\vec{r})|^2$

4 Řešení Schr. rovnice pro volnou částici

Př. 1: volná částice s určitou energií

$\psi(x,t) = e^{ikx}\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ vyhovuje Schr.r. pro $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$

(! nelze normovat, $\int |\psi|^2$ diverguje)

Př. 2: volná částice popsaná vlnovým balíkem (rozmazaná energie)

- Schrödingerova rovnice je lineární, platí tedy princip superpozice:

ψ_1 splňuje SR a ψ_2 splňuje SR $\Rightarrow$ $\psi = \psi_1 + \psi_2$ je také řešením SR

- to umožní sestavit z výše uvedených rovinných vln balíky, které si lze spojit s lokalizovanými částicemi (detaily osvětleny později v souvislosti s x a p-reprezentací)

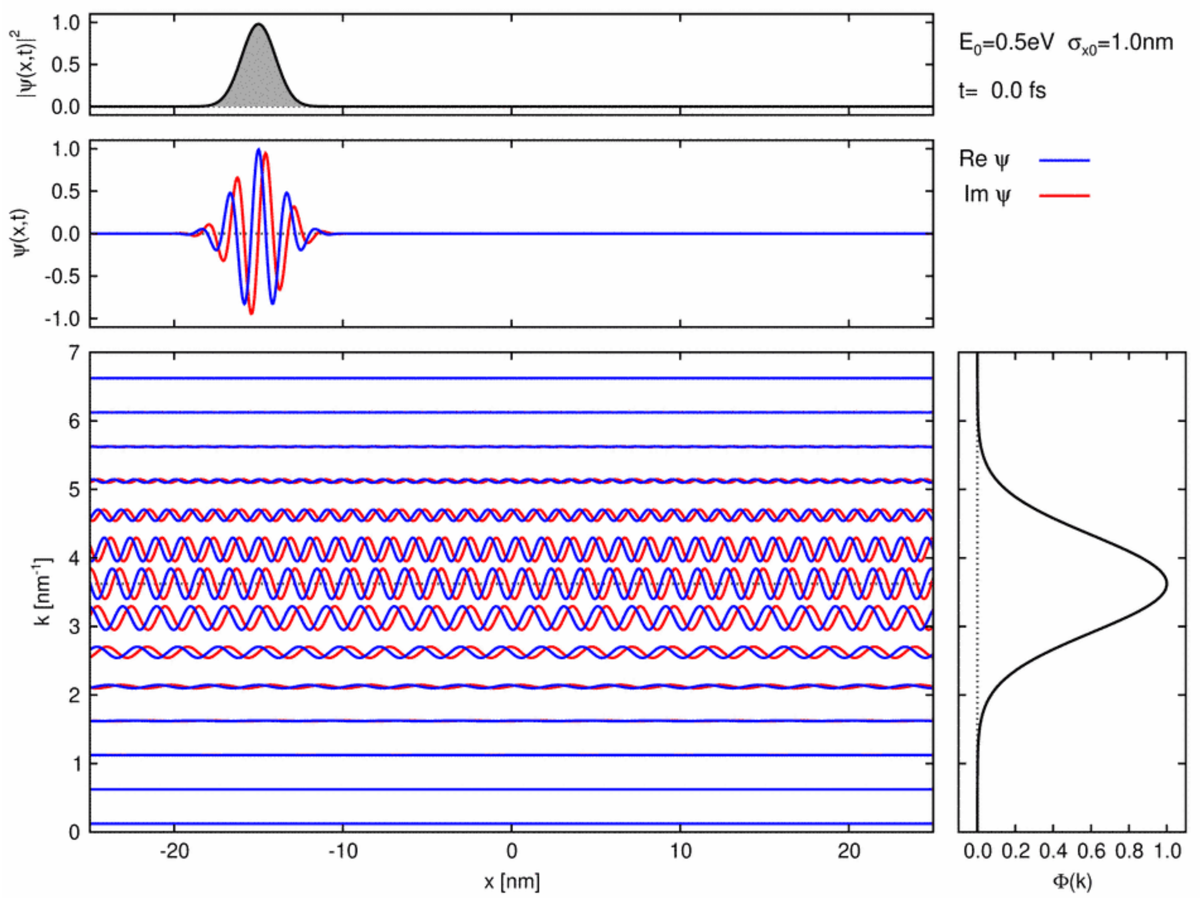
předpis $\psi(x,t) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}} \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} dk\, \phi(k)\, e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)}$ normování $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} |\phi(k)|^2 dk = 1$

  - namísto sumace integrace přes spojité k
  - pro libovolné $\phi(k)$ vyhovuje SR pro volnou částici, normované ϕ dá normované ψ
  - komplexní amplituda $\phi(k)$ udává tvar balíku a kvadrát její abs. hodnoty $|\phi(k)|^2$ odpovídá hustotě pravděpodobnosti pro k:

$$P(\text{v balíku detekujeme vlnu s } [k, k+dk]) = |\phi(k)|^2 dk$$

- animované ukázky pro gaussovské $\phi(k) = \dfrac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}\,\sigma_k}}\, e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}}$ $\rightarrow$ gaussovská $|\psi|^2$

Pozn.: v obrázku jsou ψ, $|\psi|^2$, ϕ vhodně naškálovány



ukázky příspěvků do balíku s patřičnými amplitudami $\Phi(k)$

Doplněk - ověření reálnosti E ve stacionární Schr. rovnici

stacionární Sch.r. vynásobíme $\psi^*(\bar{r})$ a integrujeme přes celý prostor

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\iiint \psi^*\nabla^2\psi\, d^3\bar{r} + \underbrace{\iiint V\,\psi^*\psi\, d^3\bar{r}}_{\text{reálné}} = E\underbrace{\iiint \psi^*\psi\, d^3\bar{r}}_{\text{reálné}}$$

první integrál upravíme pomocí identity

$$\nabla\cdot(a\bar{b}) = a\,\nabla\cdot\bar{b} + \bar{b}\cdot\nabla a \quad\rightarrow\quad \nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi) = \psi^*\nabla^2\psi + \nabla\psi\cdot\nabla\psi^*$$

dále lze aplikovat Gaussovu větu na integrál z $\nabla\cdot$(něco)

$$\iiint \psi^*\nabla^2\psi\, d^3\bar{r} = -\iiint \underbrace{\nabla\psi\cdot\nabla\psi^*}_{|\nabla\psi|^2 \text{ reálné}}\, d^3\bar{r} + \oiint \psi^*\nabla\psi\cdot d\bar{S}$$

integrál přes plochu v nekonečnu dává nulu - nulový integrand

→ všechny části v první rovnici jsou reálné → E je reálné