Časový vývoj stavu určený pomocí rozkladu do vlastních stavů

- doposud poznaný způsob řešení Schrödingerových rovnic pro statický potenciál

stacionární Schrödingerova rovnice

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\Psi(x) = E\,\Psi(x)$$

→ soubor vlastních stavů $\Psi_n(x)$
a příslušných vlastních energií E_n

(může být i spojitá sada, ale indexujme jednoduše pomocí n)

→

nestacionární Schrödingerova rovnice

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

rovnici vyhovují stacionární stavy odvozené od vlastních $\Psi_n(x)$:

$$\psi_n(x,t) = \Psi_n(x)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

- princip superpozice

lineární kombinace řešení nestac. Schr. rovnice je opět řešením, explicitně:

$\psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x,t)$ s libovolnou sadou koeficientů c_n je řešením nestac. Sch. r.

Pozn. u stacionární Sch. r. to kazí energie, lze takto kombinovat jen stavy se stejnou energií

- rozklad do vlastních stavů a časový vývoj

– zadaná vlnová funkce v počátečním čase $\psi(x,t_0)$, určíme vlnovou funkci v následujících časech
(tato počáteční informace stačí, protože Sch. r. je 1. řádu v t, vlnová rovnice by chtěla i $\left.\frac{\partial\psi}{\partial t}\right|_{t_0}$)

rozklad do stac. stavů v počátečním čase

$$\psi(x,t_0) = \sum_n c_n \underbrace{\Psi_n(x)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t_0}}_{\psi_n(x,t_0)}$$

→

sestavení vlnové funkce v libov. čase

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n \underbrace{\Psi_n(x)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}}_{\psi_n(x,t)}$$

! pro jednodušší zápis v dalším zvolíme $t_0 = 0$

– nezbytná je úplnost souboru $\Psi_n(x)$, výhody při rozkládání přináší jeho ortogonalita

úplnost – libovolnou fyzikální vlnovou funkci daného systému je možné vyjádřit jako lineární kombinaci $\psi(x,0) = \sum_n c_n \Psi_n(x)$

ortogonalita – dvě různé funkce ze souboru $\Psi_n(x)$ mají nulový skalární součin

$$S_{nn'} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x)\,\Psi_{n'}(x)\,dx = 0 \quad (\text{pro } n \neq n')$$

navíc budeme chtít normovaný soubor, pro který $S_{nn} = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_n(x)|^2 dx = 1$

– nalezení koeficientů rozkladu

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x)\,\psi(x,0)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x) \sum_{n'} c_{n'}\Psi_{n'}(x)\,dx = \sum_{n'} c_{n'} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x)\Psi_{n'}(x)\,dx =$$

$$= \sum_{n'} c_{n'} S_{nn'} = c_n \quad \text{díky ortonormalitě} \quad \to \quad c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x)\,\psi(x,0)\,dx$$

- ilustrace pro nekonečně hlubokou jámu

jáma v intervalu $x \in (0,L)$: vlastní stavy $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$ na int. $(0,L)$

vlastní energie $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2 m L^2}$ $\quad n = 1,2,3\ldots$

1) ortogonalita

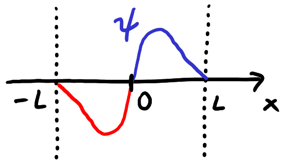
$$S_{nn'} = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x)\, \varphi_{n'}(x)\, dx = \frac{2}{L}\int_0^L \sin\frac{n\pi x}{L} \sin\frac{n'\pi x}{L}\, dx = \frac{2}{L}\int_0^L \frac{1}{2}\left[\cos\frac{(n-n')\pi x}{L} - \cos\frac{(n+n')\pi x}{L}\right] dx$$

jediný nenulový integrál pro $n=n'$, zde $\cos\frac{(n-n')\pi x}{L} = 1$ $\rightarrow$ $S_{nn'} = \underbrace{\delta_{nn'}}_{\text{kroneckerovo delta}} = \begin{cases} 1 & n = n' \\ 0 & n \neq n' \end{cases}$

2) úplnost

Fyzikální vlnová funkce $\psi(x)$ splňuje okrajové podmínky $\psi(x=0) = 0$, $\psi(x=L) = 0$

provedeme liché prodloužení $F(x) = \begin{cases} \psi(x) & x \in [0,L] \\ -\psi(-x) & x \in [-L,0] \end{cases}$



Funkci s periodou $2L$ je možné vyjádřit Fourierovou řadou

$$F(x) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty}\left(a_n \cos\frac{2\pi n x}{2L} + b_n \sin\frac{2\pi n x}{2L}\right)$$

v případě liché funkce je $a_n = 0$, $n = 0,1,2,\ldots$ $\longrightarrow$ soubor $\varphi_n \sim \sin\frac{n\pi x}{L}$ zachytí libovolnou fyzikální ψ

Př. časový vývoj stavu $\psi(x,0) = c_1 \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{\pi x}{L} + c_2 \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\frac{2\pi x}{L}$

Funkce zadána již v rozloženém tvaru $\psi(x,0) = c_1 \varphi_1(x) + c_2 \varphi_2(x)$

$\rightarrow$ v obecném čase t: $\psi(x,t) = c_1 \varphi_1(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + c_2 \varphi_2(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}$

časový vývoj hustoty pravděpodobnosti

$$|\psi(x,t)|^2 = \psi^*(x,t)\,\psi(x,t) = \left(c_1^* \varphi_1^* e^{+\frac{i}{\hbar}E_1 t} + c_2^* \varphi_2^* e^{+\frac{i}{\hbar}E_2 t}\right)\left(c_1 \varphi_1 e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} + c_2 \varphi_2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}\right)$$

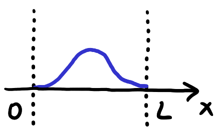
$$= \underbrace{|c_1|^2 |\varphi_1(x)|^2 + |c_2|^2 |\varphi_2(x)|^2}_{\text{statický příspěvek}} + \underbrace{c_1^* c_2\, e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2-E_1)t}\, \varphi_1^*(x)\varphi_2(x) + c_1 c_2^*\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_2-E_1)t}\, \varphi_1(x)\varphi_2^*(x)}_{\text{oscilující interferenční příspěvek (reálná fce)}}$$

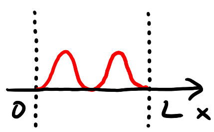
- normování $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = |c_1|^2 \underbrace{\int |\varphi_1|^2}_{1} + |c_2|^2 \underbrace{\int |\varphi_2|^2}_{1} + \ldots \underbrace{\int \varphi_1^* \varphi_2}_{0} + \ldots \underbrace{\int \varphi_2^* \varphi_1}_{0}$

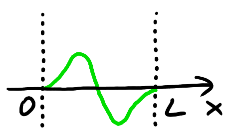
$\rightarrow$ musí být $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$

- animace pro reálné c_1, c_2: $c_1 = 1, c_2 = 0$; $c_1 = 0, c_2 = 1$; $c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$; $c_1 = \frac{2}{\sqrt{5}}, c_2 = \frac{1}{\sqrt{5}}$

$$|\psi(x,t)|^2 = c_1^2\, \frac{2}{L}\sin^2\frac{\pi x}{L} + c_2^2\, \frac{2}{L}\sin^2\frac{2\pi x}{L} + 2 c_1 c_2\, \frac{2}{L}\sin\frac{\pi x}{L}\sin\frac{2\pi x}{L} \cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t\right)$$







osciluje s frekv. $\omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$