Kapitola 5

Schrödingerova rovnice

Obsah:

Literatura:

[1] BEISER A. "Úvod do moderní fyziky"
[2] FONG "Elementary Quantum Mechanics"

V předcházející kapitole jsme si nastínili základy vlnové mechaniky. Ukázali jsme si, jak v rámci tohoto matematického modelu reprezentovat klasický svět, a také, jak fyzikálně interpretovat získané kvantitativní výsledky. Zjistili jsme, že veškerá informace o systému je uchována ve vlnové funkci, která, je-li známa, jednoznačně určuje jeho stav. Implicitně jsme přitom předpokládali, že studovaný systém můžeme vždy nějakým způsobem připravit v libovolném stavu (například vhodným "uplácáním" vlnového balíku) reprezentovaném kvadraticky integrovatelnou vlnovou funkcí. Situace je zde podobná té, s níž jste se setkali v klasické mechanice, kdy stav systému zadávají souřadnice a rychlosti jednotlivých částic. Tam si na základě přímé zkušenosti umíme představit, jak připravíme studovaný systém v blíže specifikovaném stavu. Není tudíž překvapující, že si víru, že to vždy jde, přenášíme i za hranice klasického světa. Nic na tom nemění fakt, že ve světě kvantovém není zdaleka na první pohled jasné, jak konkrétně máme postupovat.[1]

Ve světě plném změn je ovšem statický popis systému, v němž čas hraje roli pouhého konstantního parametru, nutně neúplný. Vždyť i v klasické fyzice hrál stav často roli "pouhé" počáteční podmínky pohybových rovnic, jejichž řešení (klasická evoluce) bylo zpravidla to, co nás zajímalo především. Je tedy jasné, že statický popis de Broglieho vln, který byl podán v předchozí kapitole, je nutné doplnit i o popis dynamický. Je tedy načase zformulovat pohybovou rovnici pro vlnovou funkci.

Z pochopitelných důvodů je nesmyslné hovořit o odvození této rovnice, stejně jako nelze odvodit například rovnice Newtonovy či Maxwellovy. Můžeme však formulovat plausibilní argumenty pro naše kroky, které povedou k napsání konkrétní matematické formule, a tuto formuli následně porovnat s tím, co již známe (tj. s klasickou mechanikou a experimentální zkušeností). Ověřit však, zda jsme zvolili formuli správnou, můžeme pouze jejím opakovaným použitím při řešení konkrétních problémů a srovnáním takto získaných výsledků s experimentem.

Oč tedy půjde v této kapitole? Především si ukážeme cestu vedoucí k slavné Schrödingerově rovnici. Ukážeme si rovněž její souvislost s klasickou mechanikou. Ač to nebude na první pohled zřejmé - Schrödingerova rovnice je parciální diferenciální rovnice prvního řádu v čase a klasické pohybové rovnice obyčejné diferenciální rovnice, navíc druhého řádu v čase - ukážeme, že klasická mechanika je přiblížením přesnější Schrödingerovy vlnové mechaniky. Podíváme se blíže i na matematickou podstatu Schrödingerovy rovnice.

[1] Pochopitelně vše, co bylo právě řečeno, jsme v předcházející kapitole diskutovali pouze pro nejjednodušší ze všech možných systémů - ten, který obsahoval jedinou bodovou částici. Proto slova jako "klasický svět" a "kvantový svět" jsou v kontextu toho, co známe velmi silná. Bohužel se musíme smířit s tím, že během našeho povídání o kvantové teorii se i nadále soustředíme pouze na jednočásticové systémy. Z důvodu jednoduchosti a průhlednosti výkladu.

5.1 Stacionární Schrödingerova rovnice

[1] str. 159 - 165
[2] str. 42 - 48

Stacionární Schrödingerova rovnice

Obecné monochromatické vlny, které jsme zavedli vztahem (4-9)

$$\psi(\mathbf{r},t) = \Psi(\mathbf{r})\exp(-i\omega t) = \Psi(\mathbf{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)$$

v předcházející kapitole, popisují stavy bodové částice s přesně definovanou energií v poli vnějších sil. Příslušné pole budeme popisovat jeho potenciálem V(**r**). Tyto vlny jsou, jak jsme si ukázali, speciálním řešením vlnové rovnice

$$\Delta\psi(\mathbf{r},t) - \frac{1}{v_f^2}\frac{\partial^2\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t^2} = 0 \ , \qquad (5\text{-}1)$$

u nějž jsme vhodnou volbou časové závislosti eliminovali "nefyzikální" stupně volnosti [2].

Dosazením vztahu (4-9) do (5-1) získáme snadno, že prostorová část vlnové funkce ψ musí splňovat rovnici

$$\Delta\Psi(\mathbf{r}) - \frac{\omega^2}{v_f^2}\Psi(\mathbf{r}) = 0 . \qquad (5\text{-}2)$$

Uvědomíme-li si však, že podle (4-6) a de Broglieho relací zobecněných na případ částice ve vnějším silovém poli je

$$\frac{\omega}{v_f} = k = \frac{p}{\hbar} \ , \qquad (5\text{-}4)$$

kde k je velikost vlnového vektoru a p velikost hybnosti částice v daném místě prostoru, a že pro velikost hybnosti platí podle zákona zachování energie vztah [3]

$$p = \sqrt{2m(E - V(\mathbf{r}))} \ , \qquad (5\text{-}5)$$

máme z (5-2) okamžitě

---

[2] Viz Dodatek I k předcházející kapitole.

[3] Všimněte si několika podstatných faktů:

a) K získání vztahu (5-5) jsme použili nerelativistický zákon zachování energie $E = p^2/2m + V(\mathbf{r})$. Schrödingerova teorie bude tedy nerelativistická.

b) Pro volnou částici jsme v nerelativistickém přiblížení psali pro celkovou energii částice vztah (4-5). Započítávali jsme tedy do ní kinetickou i klidovou část. Z (5-5) je jasné, že nadále do energie E klidovou část m_0c^2 nezapočítáváme.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\mathbf{r}) - V(\mathbf{r})\,\Psi(\mathbf{r}) = E\,\Psi(\mathbf{r})\,. \tag{5-6}$$

Po svém objeviteli se tato rovnice nazývá **Schrödingerova**. Protože popisuje pouze chování prostorové části monochromatické vlnové funkce (a tedy neobsahuje časové derivace), doplňuje se její název zpravidla přívlastkem **stacionární** [4].

Stacionární Schrödingerovy rovnice jako matematický problém

Z matematického hlediska je stacionární Schrödingerova rovnice lineární parciální diferenciální rovnice druhého řádu pro funkci tří proměnných $\Psi(x,y,z)$. O této funkci předpokládáme, že je minimálně po částech dvakrát spojitě diferencovatelná na R^3 [5]. Z fyzikální interpretace vlnové funkce ψ vyplývá, že řešení stacionární Schrödingerovy rovnice musí být kvadraticky integrovatelné. Musí tedy splňovat

$$\int_{R^3} |\Psi(\mathbf{r})|^2 \, d^3\mathbf{r} < +\infty \,. \tag{5-7}$$

Ovšem spojitá funkce splňující (5-7) musí v nekonečnu dostatečně rychle klesat k nule, a tedy musí platit

$$\lim_{|\mathbf{r}|\to+\infty} |\Psi(\mathbf{r})| = 0 \,. \tag{5-8}$$ [6]

---

[4] Stacionární Schrödingerova rovnice tedy popisuje prostorovou část vlnové funkce odpovídající speciálním stavům bodové částice s přesně definovanou energií ve vnějším časově neproměnném potenciálovém poli. V nerelativistickém přiblížení samozřejmě. Časová závislost příslušné vlnové funkce je obsažena pouze exponenciálním faktoru $\exp(-i\omega t)$. Jak jsme již uvedli dříve, experimentálně ověřitelnou informaci o jakémkoliv jednočásticovém systému nenese samotná vlnová funkce ψ, ale kvadrát její absolutní hodnoty. Podle (4-9) je ale $|\psi|^2 = |\Psi|^2$. Tedy fyzikálně zajímavou je pouze prostorová část monochromatické vlnové funkce, která podle Bornovy statistické interpretace určuje hustotu pravděpodobnosti nalezení částice v daném místě prostoru. Vzhledem k tomu, že tato hustota nezávisí na čase, můžeme říci, že námi studovaný jednočásticový systém nemění z hlediska experimentátora s časem svůj stav. Také z tohoto důvodu se rovnice (5-6) nazývá stacionární.

[5] Je-li potenciál $V(\mathbf{r})$ spojitou funkcí souřadnic, je jistě rozumné předpokládat, že vlnová funkce Ψ, která je řešení stacionární Schrödingerovy rovnice, bude mít spojité druhé derivace na celém R^3. Často se však v konkrétních úlohách budeme setkávat s modelovými potenciály, které obsahují nespojitosti typu konečného či nekonečného skoku. Množina R^3 se pak rozpadne na souvislé oblasti, na nichž bude funkce $V(\mathbf{r})$ spojitá, ale na hranicích mezi nimi se bude měnit nespojitě skokem. Je jasné, že na jednotlivých oblastech budeme moci hledat řešení stacionární Schrödingerovy rovnice jako dvakrát spojitě diferencovatelnou funkci. Na samotných rozhraních mezi těmito oblastmi budou však spojité pouze první derivace nebo dokonce jen samotná vlnová funkce. Druhé derivace funkce Ψ se budou při přechodu hranice měnit obecně nespojitě. V tomto smyslu je třeba chápat označení vlnové funkce jako po částech dvakrát spojitě diferencovatelné.

Ilustraci metody řešení stacionární Schrödingerovy rovnice s nespojitým potenciálem si ponechejme do následující kapitoly.

[6] Podmínka (5-8) je však pouze nutnou podmínkou platnosti vztahu (5-7), neboť nic neříká o rychlosti poklesu absolutní hodnoty $|\Psi|$, když se blížíme do prostorového nekonečna. Předpokládejme pro ilustraci tohoto problému, že se studovaná funkce chová v asymptotické oblasti velkých hodnot $|\mathbf{r}| > r_0$ (v dalším budeme velikost polohového vektoru $|\mathbf{r}|$ označovat prostě r) jako inverzní mocnina, tj.

$$|\Psi(\mathbf{r})| \propto \frac{1}{r^\alpha}\,.$$

Pak ovšem

K jednoznačnému řešení parciálních diferenciálních rovnic potřebujeme kromě samotné rovnice zadat ještě navíc tzv. **okrajovou podmínku**. Je jasné, že její roli zde přebírá vztah (5-7) resp. (5-8).

Energetické spektrum

Vždy tedy budeme hledat takové řešení stacionární Schrödingerovy rovnice, které v nekonečnu klesá dostatečně rychle k nule. Takové řešení reprezentuje fyzikálně realizovatelný stav studovaného jednočásticového problému. Jak se ukazuje v teorii parciálních diferenciálních rovnic, existuje netriviální řešení (tj. takové, které není identicky rovno nule) problému tvořeného rovnicí (5-6) a okrajovou podmínkou (5-7) jen pro některé hodnoty parametru E (celková mechanická energie). Množina všech přípustných hodnot energií E je vždy nejvýše spočetná a její prvky zadávají izolované kvantové energetické hladiny. Nazýváme ji **diskrétním energetickým spektrem** [7]. Prvky diskrétního energetického spektra můžeme snadno uspořádat podle velikosti a takto zobrazit vzájemně jednoznačně na množinu přirozených čísel (nebo nějakou její část) a jednotlivé energie pak reprezentovat tímto způsobem přiřazenými **kvantovými čísly**. Příslušné vlnové funkce, které jsou řešením Schrödingerovy stacionární rovnice s konkrétní volbou kvantované energie E, pak nazýváme **vlastními funkcemi** příslušejícími hodnotě energie E z diskrétního energetického spektra. Tyto funkce chápeme jako funkce tří proměnných (složky polohového vektoru), nicméně jejich konkrétní tvar závisí parametricky i na energii E (resp. jí přiřazeném kvantovém číslu) a často i na dalších parametrech (opět kvantovaných a obvykle reprezentovaných dalšími vhodnými kvantovými čísly).

V následujícím odstavci této kapitoly využijeme tzv. **princip superpozice**, který je ústředním postulátem Schrödingerovy vlnové mechaniky. Ten říká,

že libovolný fyzikálně realizovatelný stav systému reprezentovaný kvadraticky integrovatelnou vlnovou funkcí můžeme získat jako lineární superpozici monochromatických vln (tedy řešení stacionární Schrödingerovy rovnice).

K tomuto účelu, jak zjistili matematikové, však zdaleka nestačí vlastní funkce odpovídající diskretnímu energetickému spektru. Množinu používaných vlastních funkcí musíme proto rozšířit ještě o další monochromatické vlnové funkce, které sice řeší stacionární Schrödingerovu rovnici, ale porušují okrajovou podmínku (5-7). Nereprezentují tedy žádné fyzikálně realizovatelné stavy, ale jsou nutné k tomu, abychom mohli libovolný z těchto stavů "uplácat" z monochromatických vln [8].

$$\int_{r>r_0} |\Psi(r)|^2 \, d^3\mathbf{r} = 4\pi \int_{r_0}^{+\infty} |\Psi(r)|^2 \, r^2 \, dr = 4\pi A^2 \left[\frac{r^{3-2\alpha}}{3-2\alpha} \right]_{r_0}^{+\infty} .$$

Aby však byl výraz v hranaté závorce konečný, musí platit $3-2\alpha < 0$, neboli $\alpha > 3/2$. Funkce Ψ musí tedy v nekonečnu konvergovat k nule rychleji než $r^{-3/2}$.

[7] Všimněte si, že kvantování energie není v rámci Schrödingerovy teorie nezávislým postulátem, ale pouhým důsledkem vlnového popisu a Bornovy statistické interpretace tohoto popisu. Nebylo jej tedy nutno do teorie násilně vložit (jako například v teorii Planckově, Bohrově či Sommerfeld-Wilsonově), naopak z ní přirozenou cestou vyplynulo.

[8] Vzpomeňte si na rovinné monochromatické vlny diskutované v předcházející kapitole.

Ukazuje se, že v případě těchto dodatečných řešení stacionární Schrödingerovy rovnice je nutno okrajovou podmínku (5-7) nahradit požadavkem omezenosti v nekonečnu [9]. Musí tedy existovat takové $r_0 > 0$, že

$$\sup_{r>r_0} \left|\Psi(\mathbf{r})\right| < +\infty \ . \qquad (5\text{-}8)$$

Opět se ukazuje, že řešení rovnice (5-6) splňující okrajovou podmínku (5-8) existuje pouze pro některé hodnoty energie E. Tentokrát je však množina těchto přípustných hodnot energie nespočetná a zpravidla totožná s nějakým intervalem na reálné ose. Proto ji nazýváme **spojitým energetickým spektrem** a jednotlivým energiím příslušející řešení stacionární Schrödingerovy rovnice s okrajovou podmínkou (5-8) **vlastními funkcemi odpovídajícími spojitému energetickému spektru** [10].

O tom, jak konkrétně vypadá energetické spektrum příslušného systému, rozhoduje charakter systému samotného. Ve speciálním případě jednočásticového systému ve vnějším potenciálovém poli pak funkční tvar potenciálu V(**r**). Obecně může spektrum tvořit jak spojitá tak i diskrétní část. Chybí-li spojitá část, hovoříme o **čistě diskrétním spektru,** pokud chybí část diskrétní, hovoříme o **spektru čistě spojitém**. Konkrétní příklady systémů s čistě spojitým a čistě diskrétním jakož i se smíšeným energetickým spektrem uvedeme v následujících kapitolách. Nezávisí-li vlnová funkce odpovídající konkrétní energii na žádném dalším parametru, hovoříme o **nedegenerované energetické hladině**. V opačném případě energetickou hladinu nazveme **degenerovanou**.

Jednorozměrná stacionární Schrödingerova rovnice

Pokud by náš prostor nebyl izomorfní [11] trojrozměrnému afinnímu (vektorovému) prostoru, ale prostoru jednorozměrnému (přímce), nabývala by stacionární Schrödingerova rovnice jednodušší tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} - V(x)\,\Psi(x) = E\,\Psi(x) \ , \qquad (5\text{-}9)$$

který se obvykle nazývá **jednorozměrnou stacionární Schrödingerovou rovnicí**. Praktický význam rovnice (5-9) můžeme spatřovat v několika směrech :

a) Popisuje modelový systém částice vázané na přímku. Tento systém kvalitativně vystihuje základní "kvantové" rysy trojrozměrného světa, je však matematicky výrazně jednodušší než odpovídající model trojrozměrný. Vždyť ústřední rovnice popisující kvantování energie je tentokrát obyčejnou diferenciální rovnicí druhého řádu, lineární, ač ne s konstantními koeficienty. Oprávněně tedy můžeme očekávat, že námaha vynaložená na její řešení bude mnohem menší než v obecném trojrozměrném případě.

---

[9] Tento požadavek bychom měli nejspíše nazvat "poznávacím znamením", neboť ve skutečnosti je situace poněkud složitější. Bohužel neznalost matematického aparátu nám nedovoluje hlubší analýzu tohoto problému. Pro naše účely je podmínka vyjádřená následujícím vztahem vhodným zjednodušením.

[10] Z linearity stacionární Schrödingerovy rovnice a homogenity obou typů okrajových podmínek vyplývá, že příslušná vlnová funkce je určena až na multiplikativní (obecně komplexní) konstantu. Tu můžeme určit například normováním nalezené vlnové funkce k jedničce. Ovšem stav částice určuje stejně dobře kterákoliv z nenormovaných vlnových funkcí řešících stacionární Schrödingerovu rovnici s konkrétní přípustnou volbou energie. Je tedy rozumné ztotožnit stav částice s jednorozměrným komplexním vektorovým prostorem všech nenormovaných vlnových funkcí.

[11] Alespoň lokálně

b) Jak uvidíme později, i speciální trojrozměrné systémy je možno po jistých úpravách popsat rovnicí typu (5-9). Jednorozměrný model není tedy ryze akademický, setkáme se s ním i při studiu realistických fyzikálních systémů.

Řešení rovnice (5-9) hledáme jako dvakrát spojitě diferencovatelné, je-li funkce V(x) spojitá. V obecnějším případě, s nímž se můžeme setkat, kdy je funkce V(x) pouze po částech spojitá [12], hledáme toto řešení jako spojitou funkci (eventuálně se spojitou první derivací) po částech dvakrát spojitě diferencovatelnou na R.

Vše ostatní, co bylo řečeno o matematické struktuře trojdimenzionální Schrödingerově rovnici, zejména o klasifikaci spekter, zůstává po nepatrných modifikacích[13] v platnosti i v jednorozměrném případě.

Nestacionární Schrödingerova rovnice

[1] str. 159 - 165
[2] str. 42 - 48, str. 62 - 68

Nestacionární Schrödingerova rovnice

Stacionární Schrödingerova rovnice popisuje přípustné energie systému a jim odpovídající vlnové funkce. Neříká však nic o tom, jak se bude systém vyvíjet, pokud jej na počátku připravíme v libovolném fyzikálně realizovatelném stavu (reprezentovaném kvadraticky integrovatelnou vlnovou funkcí). Cílem tohoto odstavce je dát odpověď právě na tuto otázku.

Podle principu superpozice je možno libovolný realizovatelný stav systému získat jako lineární superpozici monochromatických (stacionárních) stavů. Ve speciálním případě jednočásticového systému s čistě diskrétním nedegenerovaným spektrem (tvořeným energiemi E_n, kterým odpovídají vlastní funkce Ψ_n)[14] to znamená, že pro libovolnou kvadraticky integrovatelnou vlnovou funkci můžeme psát

$$\psi(\mathbf{r},t) = \sum_n \Psi_n(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right). \qquad (5\text{-}10)$$

Protože evoluční rovnice musí obsahovat časovou derivaci vlnové funkce, derivujme podle času vztah (5-10). Získáme tak

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \sum_n E_n \Psi_n(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right). \qquad (5\text{-}11)$$

Ovšem podle předpokladu je Ψ řešením stacionární Schrödingerovy rovnice a musí tedy platit relace (5-6), v níž doplníme nezbytný index n. Proto je možno (5-11) přepsat na tvar

---

[12] Reálnou funkci reálné proměnné nazýváme po částech spojitou na R, je-li tato funkce spojitá na konečném sjednocení otevřených intervalů, které po vzájemném sjednocení a přidání jejich krajních bodů dají celé R.

[13] Pouze trojrozměrnou integraci přes R^3 je nutno nahradit integrací na reálné ose a mírně modifikovat závěry poznámky 6, což ponechejme čtenáři jako jednoduché cvičení.

[14] Výsledky získané pro tento speciální systém je možno snadno rozšířit i na obecný jednočásticový systém a nakonec i na systémy mnohočásticové. Speciálních předpokladů se podržíme pro přehlednost zápisu.

$$\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\sum_n\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi_n(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\Psi_n(\mathbf{r})\right\}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right) =$$
$$= \frac{i}{\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\left\{\sum_n \Psi_n(\mathbf{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right)\right\} - \frac{i}{\hbar}V(\mathbf{r})\sum_n \Psi_n(\mathbf{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right) \tag{5-12}$$

Po úpravách a započtení (5-10) získáme nakonec

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r},t)\ , \tag{5-13}$$

tedy slavnou **nestacionární Schrödingerovu rovnici** [15].

Nestacionární Schrödingerova rovnice jako matematický problém

Nestacionární Schrödingerova rovnice je lineární parciální diferenciální rovnicí pro komplexní funkci čtyř proměnných. Druhého řádu v prostorových a prvního řádu v časové proměnné. Její řešení hledáme jako funkci, která je spojitě diferencovatelná podle času a podle chování potenciálu minimálně spojitá (resp. jednou spojitě diferencovatelná) a po částech dvakrát spojitě diferencovatelná podle prostorových proměnných. Má-li popisovat fyzikálně realizovatelnéhou časovou evoluci jednočásticového systému, musí vlnová funkce ψ v každém časovém okamžiku splňovat **okrajovou podmínku**

$$\int_{R^3}\left|\psi(\mathbf{r},t)\right|^2 d^3\mathbf{r} < +\infty\ . \tag{5-14}$$

K jednoznačnému řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice je nutno díky přítomnosti časové derivace zadat navíc ještě tzv. **počáteční podmínku**.

$$\psi(\mathbf{r},t=0) = \psi_0(\mathbf{r})\ , \tag{5-15}$$

kde ψ_0 je libovolná kvadraticky integrovatelná a dvakrát (eventuálně po částech) diferencovatelná funkce. Tato funkce zadává stav systému, v němž jsme jej připravili na samotném počátku sledovaného vývoje. Tento počátek jsme bez újmy na obecnosti položili do času 0. Vyřešením nestacionárního problému (5-13) - (5-15) pak získáme úplnou informaci o tom, jak se bude zadaná počáteční podmínka „vyvíjet“ v čase. Dá se ukázat, že řešení rovnice (5-13) s užitím okrajové podmínky (5-14) a počáteční podmínky (5-15) je určeno jednoznačně.

Obecné řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice

Nestacionární Schrödingerova rovnice ma velmi složitou matematickou strukturu a vyřešit ji v obecném případě pro libovolnou zadanou počáteční podmínku je zpravidla možné jen s pomocí sofistikovaných numerických metod. V každém případě se však nabízí teoretická

[15] Podobně jako ve stacionárním případě můžeme i nyní snadno napsat nestacionární Schrödingerovu rovnici pro "jednorozměrný svět"

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

možnost zvládnutí tohoto problému. Ozřejměme si ji na případě jednočásticového systému s čistě diskrétním nedegenerovaným spektrem.

Obecné řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice můžeme vždy rozložit do řady podle vlastních funkcí podle vztahu (5-10). Budeme-li předpokládat, že použité vlastní funkce jsou normovány k jedničce, musíme vztah (5-10) přepsat na

$$\psi(\mathbf{r},t) = \sum_n A_n \Psi_n(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) , \qquad (5\text{-}16)$$

kde A_n jsou zatím neznámé komplexní konstanty, které určíme je z počáteční podmínky. Musí totiž platit

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \sum_n A_n \Psi_n(\mathbf{r}) \ . \qquad (5\text{-}17)$$

Není to snadné, ale dá se ukázat, že vlastní funkce příslušející diskrétní části spektra splňují, jsou-li normovány k jedničce, následující relaci

$$\int_{R^3} \Psi_n^*(\mathbf{r}) \Psi_m(\mathbf{r})\, d^3\mathbf{r} = \delta_{nm} \ .^{16} \qquad (5\text{-}18)$$

---

[16] Nesnadný je pouze obecný důkaz následující identity. Nicméně v mnoha konkrétních případech, s nimiž se později setkáme, nebude její ověření činit žádné potíže. Konkrétní výpočty si tedy ponechejme do následujících kapitol. Velmi zajímavá může být však alespoň zběžná interpetace vztahu (5-18).

Realizovatelný stav systému ve vlnové mechanice popisujeme kvadraticky integrovatelnou funkcí. V řeči dodatku II předcházející kapitoly funkcí z $L_2(R^3)$. V teorii tzv. Hilbertových prostorů se dokazuje, že $L_2(R^3)$ je lineární vektorový prostor nekonečné dimenze. Na tomto prostoru je možno zavést skalární součin definovaný vztahem

$$\langle \varphi | \psi \rangle \equiv \int_{R^3} \varphi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})\, d^3\mathbf{r} \, .$$

Ukažte sami, že uvedená formule splňuje axiomy skalárního součinu, které znáte z lineární algebry. Snad až na naprosto nepodstatnou změnu při vytýkání komplexního čísla z prvního resp. druhého činitele námi definovaného skalárního součinu, která je typická pro fyzikální konvenci. Nedejte se zmýlit pro matematiky nezvyklým označením skalárního součinu. Tuto tzv. bra-ketovou symboliku zavedl do kvantové teorie geniální anglický fyzik Dirac a již dlouho je ostatními fyziky všeobecně akceptována.

Vraťme se však k našemu tématu. V zavedené symbolice můžeme vztah (5-18) přepsat na

$$\langle \Psi_n | \Psi_m \rangle = \delta_{nm} \ .$$

Jinými slovy: řešení stacionární Schrödingerovy rovnice pro systém s čistě diskrétním nedegenerovaným spektrem jsou v definovaném skalárním součinu navzájem kolmá a tvoří ortonormální systém na $L_2(R^3)$. Snadno bychom ověřili, že tomu tak je i pro spektrum degenerované. Protože každou funkci z $L_2(R^3)$ je možno rozložit do řady typu (5-17), jsou tyto vektory vlastně jakousi "ortonormální bází" na $L_2(R^3)$.

Jak jsme tyto vektory získali? Řešením rovnice (5-6). Tu je možno přečíst tak, že aplikací jistých operací na levé straně vztahu na příslušnou vlnovou funkci se tato funkce až na jakýsi multiplikativní faktor reprodukuje. Označíme-li symbolicky $\hat{H} \equiv -\hbar^2/(2m)\,\Delta + V(\mathbf{r})$, můžeme stacionární Schrödingerovu rovnici přepsat do tvaru

$$\hat{H}\,\Psi_n = E_n \Psi_n \ ,$$

Aplikací identity na (5-17) získáme pak vyjádření pro konstanty A_n

$$A_n = \int_{R^3} \Psi_n^*(\mathbf{r})\,\psi_0(\mathbf{r})\,d^3\mathbf{r}\,. \tag{5-19}$$

Jak se zdá, máme řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice určeno počáteční podmínkou jednoznačně. Zbývá tedy ověřit, že je splněna i podmínka okrajová. Ovšem s pomocí vztahu (5-18) snadno nahlédneme, že platí

$$\int_{R^3} |\psi(\mathbf{r},t)|^2\, d^3\mathbf{r} \;\equiv \int_{R^3} \psi^*(\mathbf{r},t)\,\psi(\mathbf{r},t)\,d^3\mathbf{r} = \sum_n |A_n|^2 \;. \tag{5-20}$$

Bude-li tedy funkce ψ splňovat podmínku (5-14) v čase t=0 (a to ovšem předpokládáme, neboť vlnová funkce ψ_0 reprezentuje fyzikálně realizovatelný stav), bude ji splňovat i ve všech ostatních časech. Navíc, bude-li počáteční podmínka ψ_0 normalizována k jedničce, bude taková i funkce ψ v každém čase.

Kvantově-mechanický determinismus

Pro klasickou mechaniku je příznačný deterministický popis studovaných systémů, který nejlépe vystihuje volně parafrázovaný Laplaceův výrok - "Zadejte mi počáteční polohy a rychlosti všech částic ve vesmíru a já vám určím jeho budoucnost". To, že jde o tvrzení velmi nadnesené, jsme již částečně diskutovali v předcházející kapitole, kdy jsme zdůraznili, že každé "zadání počátečních podmínek vesmíru" je nutně zatíženo experimentálními chybami, tedy Laplaceova předpověď může být pouze přibližná [17]. Přesto se idea takto formulovaného determinismu, který nazvěme **klasickým**, stala ústředním bodem celé klasické fyziky.

---

který nápadně připomíná rovnici pro vlastní hodnoty čtvercové matice, kterou rovněž znáte z lineární algebry. Víte také, že čtvercová matice je speciální reprezentací lineárního zobrazení vektorového prostoru do sebe sama. Pochopitelně i operace na levé straně rovnice (5-6) (které jsme si označili speciálním symbolem $\hat{H}$), zadávají rovněž jakési lineární zobrazení prostoru $L_2(R^3)$ do sebe sama. Vzpomeňte si dále na větu o spektrálním rozkladu hermitovských matic, která říká, že vlastní vektory hermitovské matice jsou ortogonální a po eventuální normalizaci tvoří na studovaném (konečnědimenzionálním) vektorovém prostoru ortonormální bázi. Přestože nekonečná dimenze prostoru $L_2(R^3)$ situaci poněkud komplikuje, obdobnou větu je možno zformulovat i pro jistým způsobem "hermitovské" operátory na něm. Jistě vás nepřekvapí, že výše zavedený operátor $\hat{H}$ je jedním z nich.

[17] Kromě zatížení počáteční podmínky experimentálními chybami má Laplaceova idea i další problematické rysy. Především Laplace vycházel z klasické Newtonovy mechaniky, která je "tvořena" pohybovými rovnicemi a již zmíněnými počátečními podmínkami. Zatímco počáteční podmínky vkládáme do teorie z vnějšku jako změřená čísla, pohybové rovnice mají tvar obecných zákonů, které jsou platné pro všechny mechanické systémy. I ony však obsahují experimentální vstupy - charakteristiku vzájemných interakcí částic prostřednictvím sil resp. funkcí potenciální energie (potenciálů), které jsou však nutně taky zatíženy experimentálními chybami. Jak se ukázalo později (zejména v tomto století), někdy tyto chyby mohou způsobit, že o konrétních trajektoriích studovaných částic toho mnoho říci nemůžeme.

Je zde ovšem ještě problém technický, neboť pokud bychom chtěli řešit například byť jen nepatrnou část vesmíru - kapku vody - zcela v duchu klasické mechaniky, museli bychom najít pro danou počáteční podmínku řešení soustavy zhruba 10^{23} nelinárních diferenciálních rovnic. A to není ani dnes, v dobách velmi výkonných počítačů, možné a zřejmě ani nikdy možné nebude. Navíc by asi byly potíže se zadáním počáteční podmínky, kterou by v tomto konkrétním případě tvořilo asi 10^{24} čísel. Takže například při obvyklé reprezentaci reálného čísla 64 bity paměti použitého počítače by se jednalo o nějakých 10^{25} - 10^{26} bitů, čili řádově o 10^{20} megabytů.

Odmyslíme-li si však podtext, který deterministickému pojetí přírodních jevů dal Laplaceův výrok, nalezneme naprosto přijatelný požadavek, aby

každá fyzikální teorie byla budována tak, že zadáme-li přesně stav studovaného systému v nějakém konkrétním okamžiku, budeme moci určit přesně jeho stav v kterémkoliv okamžiku budoucím (a zpětně i minulém).

Všimněte si ovšem, že stav systému nijak konkrétně nespecifikujeme. Jeho vymezení je zcela v kompetenci konkrétní teorie, kterou budeme, je-li splněna právě formulovaná podmínka, nazývat **deterministickou**. Takovou je například klasická mechanika. Ale též mechanika vlnová. Rozdíl je pouze v tom, jak podrobně charakterizujeme výchozí stav systému. Pro odlišení od klasického pojetí se typ determinismu vyplývající ze Schrödingerovy teorie nazývá **kvantovým**.

5.3 Souvislost mezi vlnovou a klasickou mechanikou

[2] str. 54 - 62

Druhý Newtonův zákon [18]

Podle druhého Newtonova zákona, který je výchozím bodem klasické mechaniky hmotného bodu, se poloha bodové částice mění tak, že její zrychlení je v každém okamžiku přímo úměrné působící síle. Platí tedy vektorová rovnice

$$\mathbf{F} = m\,\mathbf{a}\,, \tag{5-21}$$

kde **F** je působící síla, m hmotnost a **a** zrychlení studované částice. Předpokládáme-li, že příslušné silové pole má potenciál V(**r**) (-grad V = **F**), můžeme rovnici (5-21) přepsat na tvar

$$-\mathrm{grad}\,V(\mathbf{r}) = m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2}\ . \tag{5-21'}$$

Jak jsme si ukázali v předcházející kapitole, roli polohy bodové částice hraje ve vlnové mechanice její střední hodnota, v případě normované vlnové funkce definovaná vztahem (4-20). Podívejme se, co o závislosti této veličiny na čase říká nestacionární Schrödingerova rovnice.

Derivací vztahu (4-20) podle času snadno získáme

Taková však není ani souhrnná kapacita všech paměťových médií na Zemi. Pokud bychom náhodou podobnou sumu informací přece jen shromáždili, měli bychom zcela jistě potíže s jejich přenosem. Tak například pokud bychom počítali s přenosem těchto dat během neskutečné doby jednoho roku, museli bychom dosáhnout nerealizovatelné přenosové rychlosti kolem 10^{12} megabytů za sekundu.

[18] Dříve než se začtete do následujících řádků, zopakujte si vše, co víte o diferenciálních operátorech (div, grad, Δ) a o Gaussově (Gauss-Ostrogradského) větě. Bez patřičné znalosti těchto pojmů nebude pro vás povídání o druhém Newtonově zákoně průchodné.

Na druhé straně chápejte zde používanou matematiku pouze jako prostředek k dosažení výsledku, jehož fyzikální interpretace bude naším hlavním cílem. Snažte se, aby se tento cíl neztratil v „temných“ matematických zákoutích.

$$\frac{d\overline{\mathbf{r}}}{dt} = \int_{R^3} \mathbf{r}\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\psi^* + \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\right) d^3\mathbf{r} \ , \tag{5-22}$$

kde hvězdičkou označujeme komplexní sdružení. Po dosazení za časové derivace z nestacionární Schrödingerovy rovnice máme okamžitě

$$\frac{d\overline{\mathbf{r}}}{dt} = \frac{\hbar}{2im}\int_{R^3} \mathbf{r}\left(\psi\Delta\psi^* - \psi^*\Delta\psi\right) d^3\mathbf{r} \ . \tag{5-23}$$

Je pouhým cvičením z vektorové analýzy ukázat, že

$$x_k\psi\Delta\psi^* \equiv x_k\psi(\mathrm{div}\nabla\psi^*) = \mathrm{div}\left(x_k\psi\nabla\psi^*\right) - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x_k} - x_k\nabla\psi^*.\nabla\psi \tag{5-24}$$

a analogicky

$$x_k\psi^*\Delta\psi \equiv x_k\psi^*(\mathrm{div}\nabla\psi) = \mathrm{div}\left(x_k\psi^*\nabla\psi\right) - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x_k} - x_k\nabla\psi^*.\nabla\psi \ . \tag{5-24'}$$

Dosazením těchto vztahů do (5-23) dostaneme po jednoduchých úpravách [19]

$$\frac{d\overline{\mathbf{r}}}{dt} = -\frac{\hbar}{2im}\int_{R^3}\left(\psi\,\mathrm{grad}\psi^* - \psi^*\mathrm{grad}\psi\right) d^3\mathbf{r} , \tag{5-25}$$

---

[19] Kromě uvedených členů by měla pravá strana následujícího vztahu obsahovat ještě členy typu

$$\int_{R^3} \mathrm{div}\left(x_k\psi\,\mathrm{grad}\psi^*\right) d^3\mathbf{r} \ . \tag{i}$$

Ovšem podle Gaussovy věty můžeme pro dostatečně hladké vektorové pole **A**(**r**) psát

$$\int_{R^3} \mathrm{div}\mathbf{A}\, d^3\mathbf{r} = \lim_{r\to+\infty} \oiint_{K(r)} \mathbf{A}.\mathbf{n}\, d\Sigma ,$$

kde K(r) je kulová plocha o poloměru r a $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ vektor vnější normály k ní. Symbole $d\Sigma$ jsme označili povrchovou míru, která má pro kulový povrch ve sférických souřadnicích tvar $d\Sigma = r^2 \sin(\theta)\, d\theta\, d\phi$.

Neuvažujme pro tuto chvíli závislost studovaných funkcí na úhlových proměnných, která je zde zcela irelevantní. Pak z paragrafu věnovaného stacionární Schrödingerově rovnici víme, že v asymptotické oblasti velkých r vlnová funkce závisí na vzdálenosti od počátku zhruba jako $\psi \propto \frac{1}{r^\alpha}$, kde $\alpha > 3/2$. Totéž pochopitelně platí i o jejím komplexním sdružení. Integrál (i) přepišme podle Gaussovy věty na

$$\lim_{r\to+\infty} \oiint_{K(r)} x_k\psi\,\mathrm{grad}\psi^*.\mathbf{n}\, d\Sigma ,$$

přičemž snadno zjistíme, že uvažovaný plošný integrál závisí na r jako 1/r. Příslušná limita je tedy nulová a tento člen není třeba v dalším uvažovat.

přičemž tento vztah je možno ještě dále upravit na konečný tvar[20]

$$\frac{d\overline{\mathbf{r}}}{dt} = \frac{\hbar}{im} \int_{R^3} \psi^* \mathrm{grad}\psi d^3\mathbf{r} \,. \qquad (5\text{-}26)$$

Je jistě zajímavé si povšimnout, že ze vzorce (5-26) dostáváme pro střední hodnotu hybnosti vztah

$$\overline{\mathbf{p}} \equiv m\frac{d\overline{\mathbf{r}}}{dt} = \int_{R^3} \psi^* (-i\hbar\, \mathrm{grad})\psi\, d^3\mathbf{r}\,, \qquad (5\text{-}27)$$

který je ekvivalentním vyjádřením (4-22).

Podobným postupem bychom po jistém úsilí určili i druhou časovou derivaci střední polohy částice. Získali bychom tak zajímavý vztah

$$m\frac{d^2\overline{\mathbf{r}}}{dt^2} = \int_{R^3} \psi^* \{-\mathrm{grad}\, V(\mathbf{r})\}\psi\, d^3\mathbf{r}\,, \qquad (5\text{-}28)$$

který říká, že střední hodnota zrychlení bodové částice je úměrná střední hodnotě na ni působící síly. A to zcela podle druhého Newtonova zákona. V případě silně lokalizované vlnové funkce přechází pak vztah (5-28) s pomocí věty o střední hodnotě na druhý Newtonův zákon, jak jej znáte z klasické mechaniky. Je-li totiž v daném čase vlnová funkce nenulová jen na blízkém okolí bodu **R** a na tomto okolí se potenciál ani jeho gradient příliš nemění, můžeme přibližně (avšak s dostatečnou přesností) psát vzhledem k normování vlnové funkce ψ

$$\int_{R^3} \psi^* \{-\mathrm{grad}\, V(\mathbf{r})\}\psi\, d^3\mathbf{r} \approx \{-\mathrm{grad}\, V(\mathbf{R})\}\int_{R^3} \psi^*\psi\, d^3\mathbf{r} = -\,\mathrm{grad}\, V(\mathbf{R})$$

a

$$\int_{R^3} \mathbf{r}\,\psi^*\psi\, d^3\mathbf{r} \approx \mathbf{R}\int_{R^3} \psi^*\psi\, d^3\mathbf{r} = \mathbf{R}\,.$$

[20] Snadno nahlédneme, že

$$\int_{R^3} \left(\psi\, \mathrm{grad}\psi^* - \psi^* \mathrm{grad}\psi\right) d^3\mathbf{r} = \int_{R^3} \left(\mathrm{grad}(\psi^*\psi) - 2\psi^* \mathrm{grad}\psi\right) d^3\mathbf{r}$$

a s pomocí podobných úvah jako v poznámce 20 ukážeme, že první integrand na pravé staně uvedeného výrazu po provedení integrace vypadne. K tomu použijeme modifikaci Gaussovy věty

$$\int_{R^3} \mathrm{grad}\phi\, d^3\mathbf{r} = \lim_{r\to+\infty} \oiint_{K(r)} \phi\,\mathbf{n}\, d\Sigma\,.$$

Hamilton-Jacobiho rovnice [21]

Přepišme nestacionární Schrödingerovu rovnici do nového tvaru s pomocí nové komplexní funkce S prostorových proměnných a času, kterou definujeme pomocí vlnové funkce ψ vztahem

$$\psi(\mathbf{r},t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{r},t)\right) . \tag{5-29}$$

Po dosazení do (5-13) získáme po snadných úpravách

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m}(\operatorname{grad} S)^2 + V - \frac{i\hbar}{2m}\Delta S , \tag{5-30}$$

což je až na poslední člen na pravé straně Hamilton-Jacobiho rovnice známá z klasické mechaniky.

Pokusme se „nadbytečný“ člen z pravé strany (5-30) odstranit. K tomuto účelu rozveďme funkci S do řady podle mocnin Planckovy konstanty, konkrétně

$$S(\mathbf{r},t) = \sum_{k=0}^{+\infty}\left(\frac{\hbar}{i}\right)^k S_k(\mathbf{r},t) . \tag{5-31}$$

Dosazením do (5-30) a porovnáním členů stojících na obou stranách u stejných mocnin Planckovy konstanty získáme následující řetězec rovnic

$$-\frac{\partial S_0}{\partial t} = \frac{1}{2m}(\operatorname{grad} S_0)^2 + V \tag{5-32}$$

$$-\frac{\partial S_1}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left\{2(\operatorname{grad} S_0).(\operatorname{grad} S_1) + \Delta S_0\right\} \text{ atd.} \tag{5-32'}$$

První z těchto rovnic je již **„správná“ Hamilton-Jacobiho rovnice**. Popisuje zcela zřejmě vlnově-mechanickou evoluci studované vlnové funkce v přiblížení nultého řádu vzhledem k mocninám Planckovy konstanty. Jí reprezentovaná klasická mechanika je tedy přiblížením nultého řádu Schrödingerovy vlnové mechaniky. Nultý člen rozvoje (5-31) takto odpovídá klasické akci systému v souřadnicové reprezentaci.

Započtení prvních dvou členů v rozvoji (5-31) (obsahujících S_0 a S_1 řídících se rovnicemi (5-32) a (5-32')) získáme tzv. **kvaziklasické přiblížení**, které není ničím jiným než přiblížením Schrödingerovy teorie prvního řádu. Po analýze, která přesahuje naše možnosti, bychom zjistili, že výsledky tohoto přiblížení jsou identické s těmi, které poskytuje Sommerfeld-Wilsonova kvantovací podmínka!

---

[21] Z kursu teoretické mechaniky víte, že pohybovou rovnici pro hmotný bod můžete zapsat jako parciální diferenciální rovnici pro účinek, která nese po svých tvůrcích název Hamilton-Jacobiho. Zopakujte si vše, co o této rovnici víte. Velmi zdařile je tento problém popsán v učebnici Landauově a Lifšicově (Teoretičeskaja fizika I - Mechanika) či v knize Brdičkově a Hladíkově (Teoretická mechanika).

5.4 Rovnice kontinuity

[1] str. 165 - 168
[2] str. 62 - 65

V klasické teorii pole, kdy studovaný systém popisujeme jednou či několika funkcemi definovanými na vymezené oblasti prostoru [22], hraje významnou roli tzv. **rovnice kontinuity**, kterou zpravidla zapisujeme v diferenciálním tvaru

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathrm{div}\,\mathbf{j} = 0\,, \tag{5-33}$$

kde ρ je objemová hustota nějaké veličiny a **j** její plošný tok. Přímou fyzikální interpretaci má pak její integrální tvar, který získáme integrací (5-33) přes nějakou prostorovou oblast **Ω**. Po aplikaci Gaussovy věty pak můžeme psát

$$\frac{d}{dt}\int_{\Omega} \rho\, d^3\mathbf{r} + \oiint_{\partial\Omega} \mathbf{j}.\mathbf{n}\, d\Sigma = 0\ , \tag{5-33'}$$

kde se plošný integrál počítá přes hranici oblasti **Ω**, kde jsme označili dΣ plošnou míru na ní a **n** vektor její vnější normály. Vztah (5-33'), vzhledem k definici toku **j,** říká, že se změna veličiny popsané hustotou ρ a obsažené v oblasti **Ω** rovná tomu, co do této oblasti přiteče či z ní odteče. Jde tedy o **zákon zachování** příslušné veličiny.

Vlnovou funkci můžeme jistě pokládat za (komplexní) pole definované na celém prostoru. Platí i pro ni nějaký zákon zachování typu (5-33)? Při hledání odpovědi na tuto otázku musíme opět vyjít z nestacionární Schrödingerovy rovnice. Z ní totiž pro kvadrát absolutní hodnoty vlnové funkce $|\psi|^2$ plyne

$$\frac{\partial(\psi^*\psi)}{\partial t} + \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*\right) = 0\ , \tag{5-34}$$

což po užití vektorové identity

$$f\,\Delta g = \mathrm{div}(f\,\mathrm{grad}\,g) - \mathrm{grad}\,f\,.\,\mathrm{grad}\,g$$

aplikované na ψ a ψ* dává

$$\frac{\partial(\psi^*\psi)}{\partial t} + \mathrm{div}\left\{\frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\mathrm{grad}\psi - \psi\mathrm{grad}\psi^*\right)\right\} = 0\ . \tag{5-35}$$

Tento vztah ovšem nabývá standardní tvar rovnice kontinuity, zavedeme-li

$$\rho = \psi^*\psi \tag{5-36}$$

[22] Teorie kontinua a hydrodynamika, Maxwellova teorie elektromagnetického pole.

a

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^{*}\mathrm{grad}\psi - \psi\mathrm{grad}\psi^{*}\right). \tag{5-37}$$

Jeho fyzikální interpretace je rovněž nasnadě vzhledem k interpretaci ρ jako hustoty pravděpodobnosti nalezení částice v daném místě prostoru.

Rovnice (5-35) nabývá po integraci tvar

$$\frac{d}{dt}\int_{R^3}(\psi^{*}\psi)d^3\mathbf{r} + \lim_{r\to+\infty}\oint\!\!\!\oint_{K(r)}\left\{\frac{\hbar}{2im}\left(\psi^{*}\mathrm{grad}\psi - \psi\mathrm{grad}\psi^{*}\right)\right\}.\mathbf{n}d\Sigma = 0\,, \tag{5-38}$$

kde ve druhém integrálu integrujeme přes kulovou plochu o poloměru r. Jednotkový vektor vnější normály k ní jsme standardně označili **n** a míru na ní dΣ. Podle poznámky 20 je však druhý člen na levé straně (5-36) nulový. Z rovnice kontinuity tedy vyplývá, že časová evoluce vlnové funkce podle nestacionární Schrödingerovy rovnice nemění její normalizaci. Tak například bude-li počáteční podmínka ψ_0 normovaná k jedničce, bude taková v jakémkoliv i samotná vlnová funkce [23].

[23] Ke stajnému výsledku jsme dospěli již dříve při studiu chování obecného řešení nestacionární Schrödingerovy rovnice - viz vztah (5-20).

Příklady

1) Napište stacionární a nestacionární Schrödingerovu rovnici pro

a) lineární harmonický oscilátor,

b) prostorový harmonický oscilátor,

c) nabitou bodovou částici v Coulombově poli s bodovým centrem v počátku souřadnic,

d) bodovou částici v homogenním gravitačním poli,

e) bodovou volnou částici,

f) elektron v poli elektrického dipólu.

2) Určete střední hodnotu hybnosti částice ve stavu reprezentovaném Gaussovým minimalizujícím vlnovým balíkem (4-26) podle (4-22) a (5-27) a výsledky porovnejte.

3) Zopakujte odvození provedené v odstavci 5.3 pro jednorozměrnou nestacionární Schrödingerovu rovnici.

4) Rovnice kontinuity v jednorozměrném případě má tvar

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0 .$$

Podejte její interpretaci jako zákona zachování. Ukažte, že podobnou rovnici je možno odvodit pro hustotu pravděpodobnosti vlnové funkce v jednorozměrném případě.
Ukažte, že i jednorozměrná nestacionární Schrödingerova rovnice zachovává normalizaci vlnové funkce.

5) Ukažte, že tok pravděpodobnosti (5-37) je reálný vektor.

Propočítejte si i příklady z [1] str. 177 - 178.