

## Rozdział 25

### (U.4) Równanie Schrödingera

#### 25.1 Pakiet falowy – raz jeszcze

W rozdziale 23 badaliśmy ewolucję czasową pakietu falowego o profilu gaussowskim. Pakiet taki dany jest w postaci (23.173), to jest

$$\psi(x, t) = \frac{e^{-i\theta(t)}}{\sqrt[4]{a^2\pi(1+\sigma^2t^2)}} e^{ik_0x-i\omega_0t} \exp\left[-\frac{(x-v_0t)^2}{2a^2(1+i\sigma t)}\right], \quad (25.1)$$

gdzie  $a$  jest początkową szerokością pakietu (oznaczenie  $\sigma = \hbar/ma^2$ ).  $k_0$  i  $\omega_0 = \hbar k_0^2/2m$  określają wektor falowy i energię, zaś faza  $\theta(t)$  jest dana w (23.172).

Dyskutując zachowanie się pakietu stwierdziliśmy, że  $p_0 = \hbar k_0$  jest wartością oczekiwaną pędu cząstki opisanej pakietem, jednak stwierdzenia tego nie wykazaliśmy. Co więcej, nasza dyskusja pozwoliła utożsamić  $v_0 = \hbar k_0/m$  z klasyczną prędkością cząstki. Zajmiemy się teraz ścisłymi obliczeniami, które będą uzasadnieniem przyjętych "na wiarę" stwierdzeń.

##### 25.1.1 Wartości oczekiwane $\langle x \rangle$ i $\langle x^2 \rangle$

###### Wartość oczekiwana $\langle x \rangle$

Wartość oczekiwana położenia cząstki, to z definicji

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x, t) x \psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x, t) x. \quad (25.2)$$

Podstawiając funkcje falową (25.1) lub gęstość prawdopodobieństwa (23.174) otrzymujemy

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x}{\sqrt{\pi a^2(1+\sigma^2t^2)}} \exp\left[-\frac{(x-v_0t)^2}{a^2(1+\sigma^2t^2)}\right]. \quad (25.3)$$

Biorąc nową zmienną całkowania

$$y = \frac{x-v_0t}{\sqrt{\pi a^2(1+\sigma^2t^2)}}, \quad (25.4)$$

sprowadzamy naszą całkę do postaci

$$\langle x \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy [y \sqrt{a^2(1+\sigma^2t^2)} + v_0t] e^{-y^2}. \quad (25.5)$$

Pierwszy składnik funkcji podcałkowej jest nieparzysty – nie daje wkładu. Zatem

$$\langle x \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} v_0t \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} = v_0t. \quad (25.6)$$

Wartość oczekiwana położenia "odtworza" więc klasyczny ruch jednostajny cząstki (czego możemy, dla cząstki swobodnej, oczekiwać). Jest to zgodne zarówno z naszą intuicją, jak i z twierdzeniem Ehrenfesta. Podkreślmy jednak, że dotyczy to wartości oczekiwanej położenia. O położeniu cząstki (w sensie klasycznym) w ogóle tu nie mówimy. Interpretacja pakietu podana w rozdziale 23 zyskuje więc dodatkowe, i to ściśle, potwierdzenie. Rezultat (25.6) możemy podstawić członu gaussowskiego pakietu (25.1).

### Wartość oczekiwana $\langle x^2 \rangle$

Tę wartość oczekiwaną obliczamy zupełnie analogicznie, dlatego omówimy to skrótowo. Z definicji

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x, t) x^2 \psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x, t) x^2, \quad (25.7)$$

co prowadzi (po zamianie (25.4) zmiennej całkowania) do całki

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy [y \sqrt{a^2(1 + \sigma^2 t^2)} + v_0 t]^2 e^{-y^2}, \quad (25.8)$$

bardzo podobnej do (25.5). Rozwijając kwadrat znów stwierdzamy, że człon nieparzysty w  $y$  nie daje wkładu i mamy

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} a^2 (1 + \sigma^2 t^2) \int_{-\infty}^{\infty} dy y^2 e^{-y^2} + \frac{1}{\sqrt{\pi}} v_0^2 t^2 \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} \quad (25.9)$$

Biorąc całki oznaczone z tablic dostajemy

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{2} a^2 (1 + \sigma^2 t^2) + v_0^2 t^2. \quad (25.10)$$

Wynik ten zastosujemy później do dyskusji zasady nieoznaczoności.

### 25.1.2 Wartości oczekiwane $\langle p \rangle$ i $\langle p^2 \rangle$

#### Wartość oczekiwana $\langle p \rangle$

Ponownie wychodzimy wprost z definicji

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x, t) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, t) = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x, t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x}. \quad (25.11)$$

Pochodną pod całką weźmiemy z (23.178) otrzymując

$$\langle p \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2 \left( ik_0 - \frac{x - v_0 t}{a^2(1 + i\sigma t)} \right). \quad (25.12)$$

Całka ta rozpada się na trzy składniki

$$\begin{aligned} \langle p \rangle = & -i\hbar \left\{ ik_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2 - \frac{1}{a^2(1 + i\sigma t)} \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\psi(x, t)|^2 \right. \\ & \left. + \frac{v_0 t}{a^2(1 + i\sigma t)} \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2 \right\}. \end{aligned} \quad (25.13)$$

Pierwsza i trzecia całka dają jedynki, bo pakiet falowy jest unormowany (dla dowolnego  $t$ ). Druga całka to nic innego niż  $\langle x \rangle = v_0 t$ . Widzimy więc, że druga i trzecia całka wzajemnie się znoszą. Wobec tego otrzymujemy

$$\langle p \rangle = \hbar k_0, \quad (25.14)$$

dokładnie tak, jak to omawialiśmy w rozdziale 23. Nasza uprzednia dyskusja zyskuje ściśle, formalne podstawy.

**Wartość oczekiwana  $\langle p^2 \rangle$** 

Ostatnią wartość oczekiwaną liczymy podobnie.

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x, t) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \psi(x, t) = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x, t) \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2}. \quad (25.15)$$

Drugą pochodną funkcji falowej (pakietu) obliczamy za pomocą relacji (23.178), z której otrzymujemy

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} &= \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \left( ik_0 - \frac{x - v_0 t}{a^2(1 + i\sigma t)} \right) - \frac{1}{a^2(1 + i\sigma t)} \psi(x, t) \\ &= -\frac{q}{a^2(1 + i\sigma t)} \psi(x, t) + \psi(x, t) \left( ik_0 - \frac{x - v_0 t}{a^2(1 + i\sigma t)} \right)^2 \end{aligned} \quad (25.16)$$

Podstawiając (25.16) do całki (25.15) obliczamy odpowiednie kwadraty i mamy

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle &= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2 \left\{ -\frac{1}{a^2(1 + i\sigma t)} - k_0^2 \right. \\ &\quad \left. - \frac{2ik_0 x - 2ik_0 v_0 t}{a^2(1 + i\sigma t)} + \frac{x^2 - 2xv_0 t + v_0^2 t^2}{a^2(1 + i\sigma t)} \right\}. \end{aligned} \quad (25.17)$$

Funkcja podcałkowa ma siedem składników. Pierwszy, drugi, czwarty i siódmy prowadzą po prostu do całki normalizacyjnej pakietu, która daje jedynkę. Składniki trzeci i piąty (po wydzieleniu stałych) dają  $\langle x \rangle = v_0 t$ , w efekcie czego składniki trzeci i czwarty skrócą się. Wreszcie szósty składnik produkuje  $\langle x^2 \rangle$ . Tym samym dostajemy

$$\langle p^2 \rangle = -\hbar^2 \left[ -k_0^2 - \frac{1}{a^2(1 + i\sigma t)} + \frac{\langle x^2 \rangle - v_0^2 t^2}{a^2(1 + i\sigma t)} \right]. \quad (25.18)$$

Za pomocą (25.10) eliminujemy  $\langle x^2 \rangle$

$$\langle p^2 \rangle = \hbar^2 \left[ k_0^2 + \frac{1}{a^2(1 + i\sigma t)} - \frac{1 + \sigma^2 t^2}{2a^2(1 + i\sigma t)} \right]. \quad (25.19)$$

W elementarny sposób porządkujemy dwa ostatnie składniki

$$\frac{1}{a^2(1 + i\sigma t)} - \frac{1 + \sigma^2 t^2}{2a^2(1 + i\sigma t)} = \frac{1}{a^2(1 + i\sigma t)} - \frac{(1 + i\sigma t)(1 - i\sigma t)}{2a^2(1 + i\sigma t)} = \frac{1}{2a^2}. \quad (25.20)$$

W rezultacie, wartość oczekiwana  $\langle p^2 \rangle$  przyjmuje postać

$$\langle p^2 \rangle = \hbar^2 k_0^2 + \frac{\hbar^2}{2a^2}, \quad (25.21)$$

co przyda się nam przy dyskusji zasady nieoznaczoności.

**25.2 Uogólnione twierdzenie o wiriale**

Rozważmy pewien układ fizyczny opisany hamiltonianem  $\hat{H}$ , który spełnia zagadnienie własne

$$\hat{H}|\phi_{n\alpha}\rangle = E_n|\phi_{n\alpha}\rangle, \quad (25.22)$$

gdzie indeks  $\alpha$  zdaje sprawę z możliwej degeneracji stanów  $|\phi_{n\alpha}\rangle$ . Niech  $\hat{A}$  będzie niezależną jawnie od czasu (tzn.  $\partial\hat{A}/\partial t = 0$ ) obserwabłą odpowiadającą pewnej wielkości fizycznej charakteryzującej badany układ. Wartość oczekiwana tej obserwabli spełnia równanie ruchu (4.42), tj.

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | [\hat{A}, \hat{H}] | \psi \rangle, \quad (25.23)$$

gdzie  $|\psi\rangle = |\psi(t)\rangle$  jest dowolnym stanem układu.

Niech teraz  $|\psi\rangle = |\phi_{n\alpha}\rangle$ , a więc stan układu jest stacjonarnym stanem własnym hamiltonianu. W tym stanie zachodzi relacja

$$\frac{d}{dt} \langle \phi_{n\alpha} | \hat{A} | \phi_{n\alpha} \rangle = 0, \quad (25.24)$$

i to niezależnie od tego, czy operator  $\hat{A}$  komutuje z hamiltonianem, czy też nie. Istotnie, dla stanu  $|\psi\rangle = |\phi_{n\alpha}\rangle$  z (25.23) mamy

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \phi_{n\alpha} | \hat{A} | \phi_{n\alpha} \rangle &= \langle \phi_{n\alpha} | (\hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A}) | \phi_{n\alpha} \rangle \\ &= \langle \phi_{n\alpha} | \hat{A}\hat{H} | \phi_{n\alpha} \rangle - \langle \phi_{n\alpha} | \hat{H}\hat{A} | \phi_{n\alpha} \rangle \end{aligned} \quad (25.25)$$

Stany  $|\phi_{n\alpha}\rangle$  to stany własne  $\hat{H}$  spełniające (25.22). Ponadto, z hermitowskości  $\hat{H}$  wynika, że  $\langle \phi_{n\alpha} | \hat{H} = (\hat{H} | \phi_{n\alpha} \rangle)^\dagger = (E_n | \phi_{n\alpha} \rangle)^\dagger = \langle \phi_{n\alpha} | E_n$ , bo energia  $E_n$  jest rzeczywista. Wobec tego z (25.25) otrzymujemy

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \phi_{n\alpha} | \hat{A} | \phi_{n\alpha} \rangle = E_n \langle \phi_{n\alpha} | \hat{A} | \phi_{n\alpha} \rangle - E_n \langle \phi_{n\alpha} | \hat{A} | \phi_{n\alpha} \rangle = 0, \quad (25.26)$$

co było do udowodnienia.

Otrzymaną tezę możemy zapisać nieco inaczej

$$\langle \phi_{n\alpha} | \frac{d}{dt} \hat{A} | \phi_{n\alpha} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \phi_{n\alpha} | [\hat{A}, \hat{H}] | \phi_{n\alpha} \rangle = 0. \quad (25.27)$$

Jest to tzw. uogólnione twierdzenie o wiriale, które mówi, że wartość oczekiwana pochodnej czasowej obserwabli  $\hat{A}$  obliczana w stanie własnym hamiltonianu jest równa zeru. Stany własne hamiltonianu są stanami stacjonarnymi, dlatego też wartość oczekiwana obserwabli efektywnie przestaje zależeć od czasu, więc wartość oczekiwana jej pochodnej czasowej znika.

\*\*\*\*\*