

31 SCHRÖDINGEROVA FORMULACE KVANTOVÉ FYZIKY

Pravděpodobnost výskytu

Schrödingerova rovnice

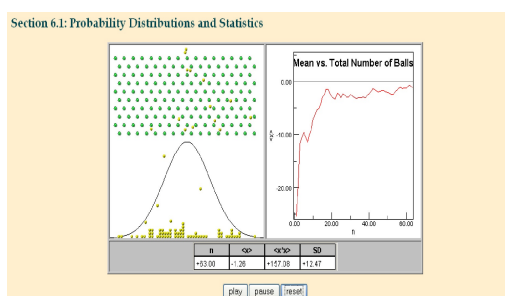
Kvantověmechanický formalismus

Korpuskulární vlastnosti částic podmiňují jejich pohyb, který vyjadřuje "newtonovská" mechanika nejdokonaleji formulovaná zákony analytické mechaniky. Existence vlnových vlastností částic podstatně mění popis zákonitostí pohybu v mikrosvětě, proto bylo nevyhnutelné vybudovat novou mechaniku. Nazýváme ji vlnová mechanika a zpravidla ji zahrnujeme pod obecnější název kvantová mechanika. Jak má vypadat základní pohybová rovnice v této nové mechanice? Tento problém se podařilo téměř současně vyřešit dvěma fyzikům - Heisenbergovi a Schrödingerovi. Heisenberg formuloval svou vlnovou mechaniku pomocí tzv. maticového počtu, Schrödinger pomocí diferenciálních rovnic. Zanedlouho po vzniku těchto teorií se podařilo dokázat, že obě teorie jsou navzájem ekvivalentní. Schrödinferův postup je bližší tradičnímu způsobu formulování rovnic pro fyzikální děje, proto se častěji používá.

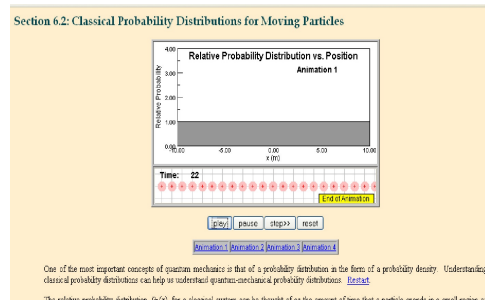
Pravděpodobnost, hustota pravděpodobnosti

Vyložíme nejprve na příkladech z makrosvěta - běžné případy, které každý zná

Rozložení pravděpodobnosti p a střední hodnota x



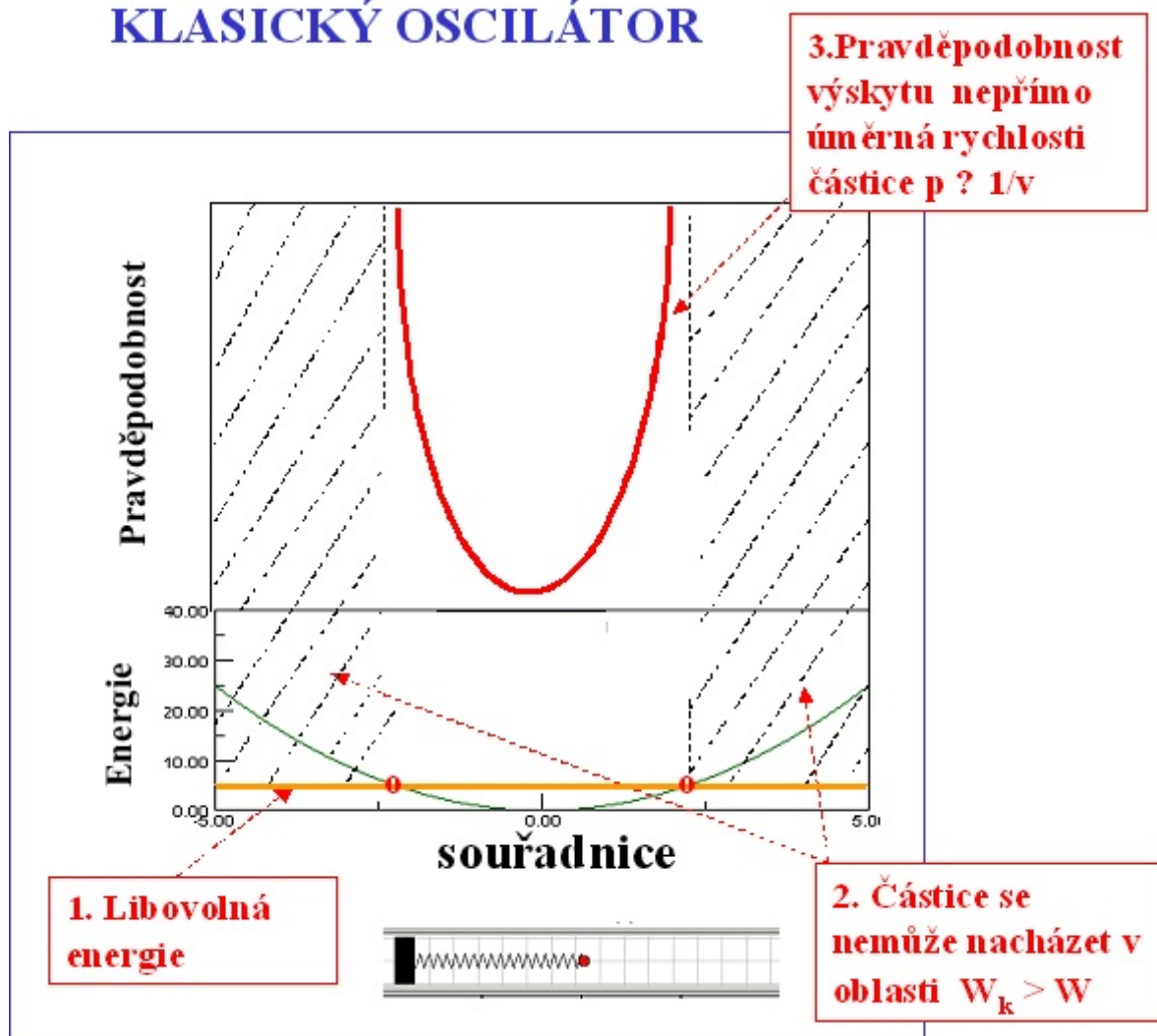
Pravděpodobnost výskytu částice při jednoduchém pohybu



Jaká je pravděpodobnost výskytu při složitějším pohybu - na příklad při kmitavém pohybu oscilátoru nebo při nárazu na stěnu. Můžeme si představit tak, že snímáme v náhodných časech fotografie polohu částice a výsledky velkého množství "měření" vynášíme do grafu ve formě hustoty pravděpodobnosti

R o z l o ž e n í
pravděpodobnosti při pohybu -
oscilátor a náraz

KLASICKÝ OSCILÁTOR



Pravděpodobnost v mikrosvětě

Popis částic pomocí vln - vlnová funkce - jaké má vlastnosti?

Jaký význam má vlnová funkce ψ ? V minulé přednášce jsme viděli, že vlnová funkce přináší informaci o pravděpodobnosti výskytu částice

$$dP = \psi(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r})d\tau, \quad (30.4)$$

kde $d\tau$ je element objemu, má proto význam pravděpodobnosti výskytu částice dP v objemu $d\tau$ nacházejícího se v místě \mathbf{r} . V tomto případě $\psi(\mathbf{r})$ je tzv. vlnová funkce stacionární, nezávislá na čase, což pro mnoho výpočtů dostačuje. Pravděpodobnost, že částice je vůbec někde v prostoru je rovna 1, proto musí platit i rovnice

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi\psi^* d\tau = 1. \quad (30.10)$$

Jestliže vlnová funkce ψ splňuje rovnici (30.10) říkáme, že je to vlnová funkce normovaná.

Zavádíme hustotu pravděpodobnosti

$$w = \frac{dP}{d\tau} = \psi(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r}),$$

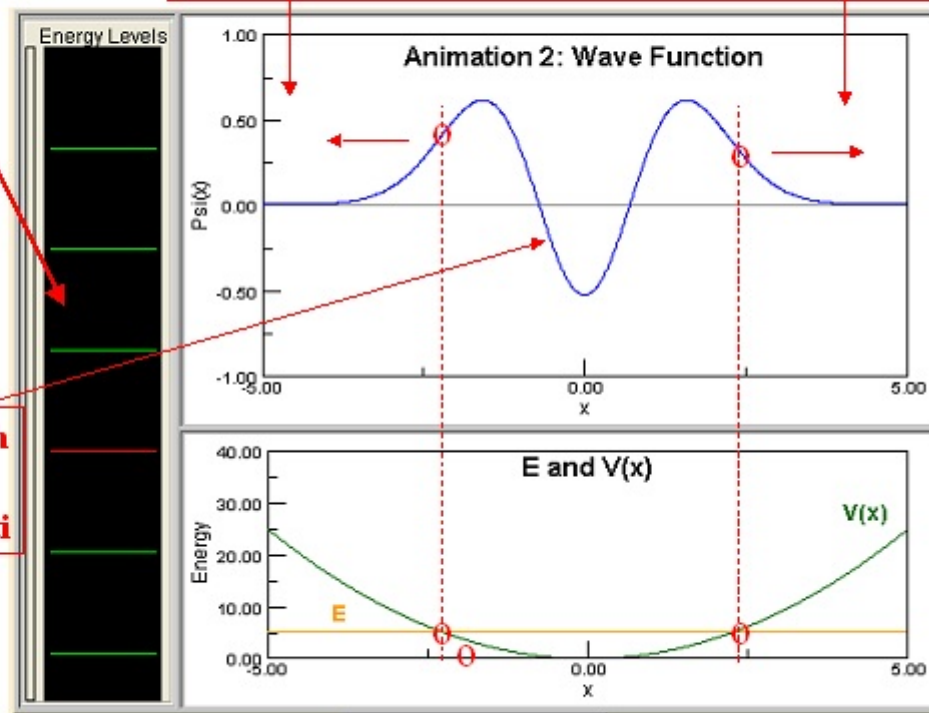
Srovnáme oscilátor v kvantové fyzice - **značné odchylky od klasického oscilátoru**

KVANTOVÝ OSCILÁTOR

1. Kvantování energie částice

2. Průnik do „zakázaných“ oblastí $W_k > W$

3. Odlišný průběh hustoty pravděpodobnosti



Zobrazeno pro kvantové číslo $n=3$

Jak získat vlnovou funkci konkrétní situace ?

31.1 Schrödingerova rovnice

31.1

Časová Schrödingerova diferenciální rovnice má tvar

$$-j\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi - W_p \Psi; \quad (31.1)$$

$$\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2},$$

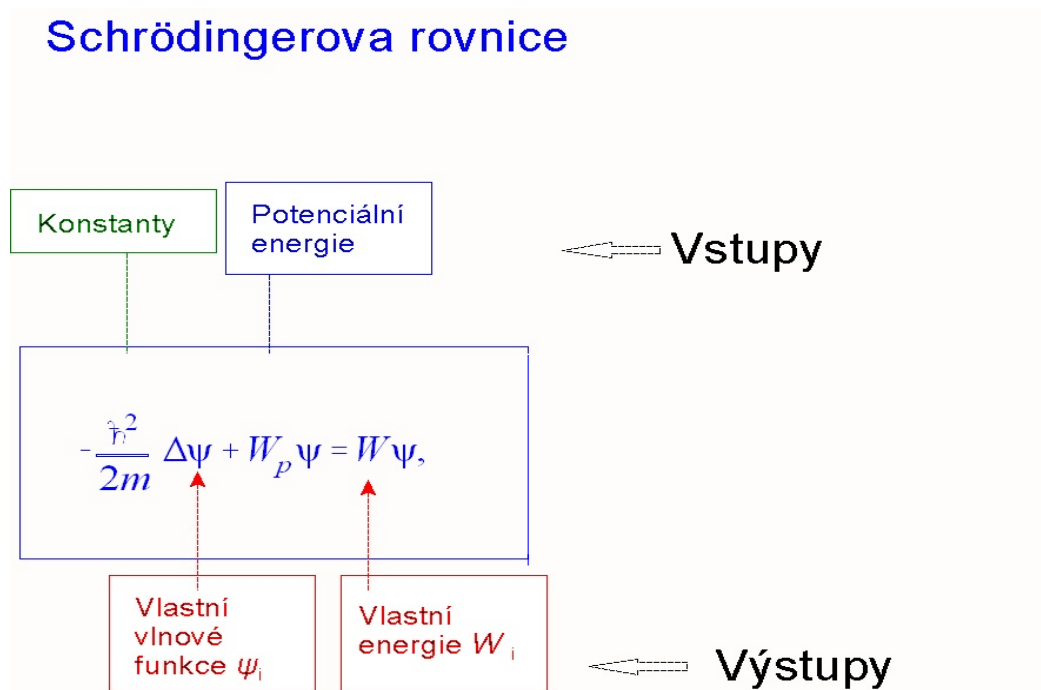
kde W_p je potenciální energie.

31.2

Schrödingerova rovnice pro stacionární stavy má tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + W_p \Psi = W \Psi, \quad (31.2)$$

kde W je celková energie (součet kinetické a potenciální energie).

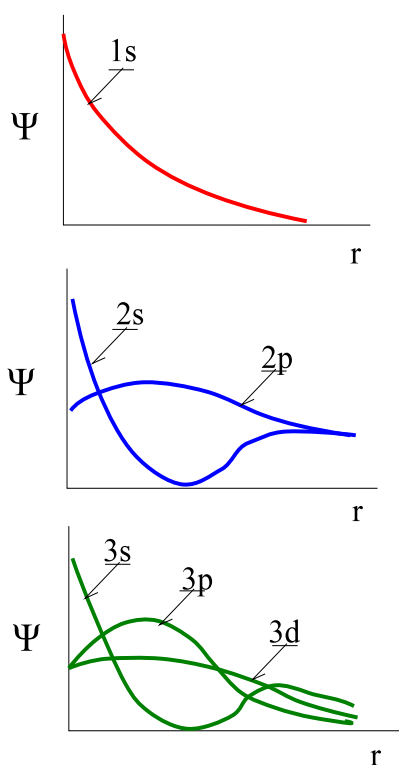


Obr.31.1 Postup řešení problémů v Schrödingerově kvantové mechanice

Velmi často nás zajímají jen informace o stacionárních dějích, např. energiích, rychlostech a drahách elektronů v krystalech ve stacionárních polích, v atomech a molekulách apod. V těchto případech můžeme rovnici (31.1) zjednodušit na tvar stacionární (31.2). Zobecněním rovnice na trojrozměrný případ vznikne diferenciální rovnice bez proměnné t , tj. "bezčasová" Schrödingerova rovnice ve tvaru (31.2). Jejím řešením se doposud získalo nesmírně mnoho základních informací o látkách a právem ji můžeme označit za základní pilíř moderní fyziky.

31.2 Kvantověmechanický formalismus

Zůstává nám vyřešit ještě poslední principiální otázku kvantové mechaniky: jak z vlnové funkce získat všechny potřebné informace o probíhajícím jevu. Např. na obr. 31.2 jsou znázorněny reálné části vlnových funkcí elektronů v závislosti na vzdálenosti od jádra atomu vodíku. Co můžeme z těchto funkcí vypočítat? Jestliže jsme v předchozím článku použili přirovnání vlnové funkce k obilí, které samo je sice bezcenné, ale obsahuje potřebné zrno, nyní se můžeme zeptat, jakou "mlátičkou" toto zrní od slámy oddělíme.

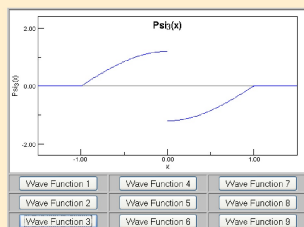


Obr. 31.2 Vlnové funkce elektronu v atomu vodíku pro různé kvantové stavy elektronu

Jaké vlastnosti musí splňovat vlnová funkce? Jedná se vlastně o pravděpodobnosti !!

Otestuj si úvahu

Problem 6.2



The animations represent possible bound-state wave functions for well-behaved potential energy functions in one dimension. In the animation, $\hbar = 2m = 1$. Which of the 9 wave functions could be a localized bound-state wave function? Why or why not?

© 2005 by Prentice-Hall, Inc. A Pearson Company

31.3

Vlnová funkce ψ , která je řešením Schrödingerovy rovnice musí splňovat, spolu se svými prvými derivacemi, tři tzv. standartní podmínky:

- musí být konečná,
- musí být jednoznačná,
- musí být spojitá.

K tomu se přidává podmínka normovanosti.

Pro zájemce s hlubším zájmem o kvantovou fyziku

31.4

Střední hodnota funkce prostorových souřadnic $G(x, y, z)$ se vypočítá pomocí vztahu

$$G_s = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* G(x, y, z) \psi dx dy dz \quad (31.10)$$

kde ψ^* je konjugovaná vlnová funkce.

31.5

Střední hodnota funkce hybnosti $p_s(p_x, p_y, p_z)$ se vypočítá pomocí vztahu

$$p_s = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{p} \cdot (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) \psi dx dy dz, \quad (31.11)$$

kde \hat{p} je operátor příslušné veličiny, který dostaneme z jeho klasického vyjádření tak, že jednotlivé složky hybnosti nahradíme operátory složek hybnosti

$$\begin{aligned} \hat{p}_x &= -j\hbar \frac{\partial}{\partial x} \\ \hat{p}_y &= -j\hbar \frac{\partial}{\partial y} \\ \hat{p}_z &= -j\hbar \frac{\partial}{\partial z}. \end{aligned} \quad (31.12)$$

31.6

Bezčasovou - stacionární - Schrödingerovu rovnici (31.2) můžeme napsat i v operátorovém tvaru

$$\hat{H}\psi = W\psi, \quad (31.13)$$

kde

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{W}_p$$

(31.14)

je operátor celkové energie.

Tabulka - Kvantověmechanické operátory

veličina

operátor

souřadnice

$$\hat{x} \equiv x$$

hybnost

$$\hat{p} \equiv -j\hbar\nabla$$

moment hybnosti

$$\hat{b} \equiv -\mathbf{r} \times j\hbar\nabla$$

potenciální energie

$$\hat{W}_p \equiv W_p$$

kinetická energie

$$\hat{W}_k \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

mechanická energie

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{W}_p$$

celková energie

$$\hat{W} = j\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

Zdůvodnění

Z fyzikálního hlediska je zřejmé, že ne každé řešení Schrödingerovy rovnice musí popisovat reálný děj. Jestliže se zkoumaná částice někde reálně v prostoru pohybuje, potom pravděpodobnost jejího výskytu nemůže být v žádném bodě nekonečně velká ani mnohoznačná. Na základě Bornovy interpretace (věta 30.3) musíme tedy pro vlnovou funkci požadovat konečnost a jednoznačnost. Ze vztahu (31.6) se dá usoudit, že derivace vlnové funkce podle prostorové souřadnice určuje hybnost, tj. také rychlost (při známé hmotnosti). Jestliže by tato funkce nebyla spojitá, její derivace by byla v bodě nespojitosti nekonečně velká, což je fyzikální nesmysl. Z těchto příčin musíme u vlnové funkce požadovat i její spojitost. Tyto požadavky jsou obsaženy ve větě 31.3.

Je zajímavé, že aplikace už jen těchto velmi obecných, téměř triviálních požadavků na vlnovou funkci má za následek, že některé fyzikální veličiny mohou mít jen diskrétní hodnoty. Schrödingerova rovnice spolu se standardními podmínkami obsahují tedy celkem přirozeně kvantový rys mikrosvěta.

Zpravidla jako prvou informaci o částici (jejich souboru) získáváme její (jejich) energii W . V celé řadě případů Schrödingerova rovnice pro stacionární stavy má řešení vyhovující standardním podmínkám 31.3 jen tehdy, má-li tento parametr jen přesně určené diskrétní hodnoty. Nazýváme je vlastní hodnoty a jim příslušné vlnové funkce vlastní funkce. Pomocí nich můžeme získat další informace o částicích. Podle věty 30.3 druhé mocniny absolutních hodnot vlnových funkcí, resp. součiny $\psi\psi^* dx$ určuje proto pravděpodobnost výskytu částice na ose x v intervalu mezi x a $x+dx$. To nám umožňuje výpočet střední hodnoty souřadnice x charakterizující polohu částice. Pomůžeme si přitom následující úvahou: Má-li určitá veličina y N možných hodnot, z kterých N_1 má hodnoty y_1 , N_2 hodnoty y_2 , atd., je střední hodnota veličiny y určena vztahem

$$\begin{aligned} y_s &= \frac{1}{N}(N_1 y_1 + N_2 y_2 + N_3 y_3 + \dots) = \\ &= \frac{N_1}{N} y_1 + \frac{N_2}{N} y_2 + \frac{N_3}{N} y_3 + \dots = \\ &= p_1 y_1 + p_2 y_2 + p_3 y_3 + \dots = \sum_i p_i y_i, \end{aligned} \quad (31.15)$$

kde $p_1, p_2, p_3 \dots$ jsou pravděpodobnosti výskytu příslušné hodnoty veličiny y . V případě spojitého rozložení se sumace nahradí integrací. V našem případě se hodnoty x (u intervalu $x, x+dx$) vyskytují s pravděpodobností $\psi\psi^* dx$. Předpokládáme-li, že funkce ψ a ψ^* jsou normované, tj. splňují podmínku (30.10), je střední hodnota souřadnice x určena integrálem

$$x_s = \int_{-\infty}^{\infty} x(\psi\psi^*) dx. \quad (31.16)$$

Bez újmy na obecnosti a správnosti tohoto vztahu a z důvodů, které uvedeme později, píšeme tento vztah ve tvaru

$$x_s = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi^* x \psi) dx \quad (31.17)$$

Bez těžkosti můžeme pochopit, že nejen střední hodnotu souřadnice x , ale i střední hodnotu každé jiné funkce této souřadnice $G(x)$ vypočítáme pomocí vztahu

$$G_s(x) = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi^* G(x) \psi) dx. \quad (31.18)$$

Zobecněním na všechny tři prostorové souřadnice dostaneme vztah (31.10), který jsme měli odvodit.

Odlišný okruh fyzikálních veličin tvoří hybnost a funkce hybnosti (např. kinetická energie). Součin vlnových funkcí $\psi\psi^*$ nepředstavuje hustotu pravděpodobnosti výskytu částice s hybností p . Proto nemůžeme pro tyto veličiny použít vztahy analogické k právě odvozeným vztahům. Jestliže bychom však hybnost (resp. její funkce) převedli do tzv. souřadnicové reprezentace, tj. vyjádřili je pomocí souřadnicových operací přímo z vlnových funkcí, mohli bychom např. pro střední hodnotu složky hybnosti psát

$$(p_x)_s = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi^* \hat{p}_x \psi) dx. \quad (31.19)$$

Zdůrazněme ještě jednou, že \hat{p}_x v tomto vyjádření značí "operaci", pomocí které můžeme z vlnové funkce určit hybnost p_x . Takové operační funkce nazýváme operátory a budeme je označovat

symbolem veličiny se stříškou (např. \hat{p}). Návod na vyjádření operátoru složky hybnosti \hat{p}_x nám může poskytnout rovnice (31.6). Z ní vyplývá, že hybnost p_x je ekvivalentní výraz $(\hbar/i) \partial/\partial x = (-i\hbar) \partial/\partial x$, proto operátor složky hybnosti \hat{p}_x (a analogicky složky \hat{p}_y a \hat{p}_z) má vyjádření (31.12). Musíme si uvědomit, že tento operátor aplikovaný jedině na funkci ψ (tj. $\hat{p}_x \psi$) poskytuje potřebnou transformaci, proto vztah pro střední hodnotu hybnosti p_x namůžeme psát ve tvaru $\int p_x (\psi^* \psi) dx$, ani ve tvaru $\int (\psi^* \psi) p_x dx$, ale jen ve tvaru

$$(\overline{p_x}) = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi^* \hat{p}_x \psi) dx. \quad (31.20)$$

Tím jsme zdůvodnili nutnost záměny vyjádření (31.16) vyjádřením (31.17).

Je zřejmé, že střední hodnotu funkce hybnosti $p(p_x, p_y, p_z)$ můžeme na základě toho vyjádřit ve tvaru (31.11).

Výpočet středních hodnot hybností a jejich funkcí si tedy vynutilo zavedení kvantověmechanických operátorů. Nabízí se myšlenka zobrazovat všechny fyzikální veličiny pomocí operátorů a i základní rovnici (31.2) vyjádřit v operátorové formě. Můžeme to lehce uskutečnit. Stačí v každé funkci vyjadřující danou fyzikální veličinu vztahem klasické fyziky nahradit všechny hybnosti jejich operátory podle vztahů (31.12) a všechny souřadnice jednoduše přeznačit na operátory. Operátor souřadnice x - \hat{x} - je totiž (např. s ohledem na vyjádření (31.17)) totožný se souřadnicí x . Tak dostaneme pro operátor potenciální energie výraz

$$\hat{W}_p(x, y, z) = W_p(x, y, z) \quad (31.21)$$

a pro operátor kinetické energie $W_k = p^2/2m$ výraz

$$\hat{W}_k = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta. \quad (31.22)$$

Schrödingerovu rovnici (31.2) můžeme potom vyjádřit ve velmi jednoduchém tvaru

$$\hat{H}\psi = W\psi,$$

kde $\hat{H} = \hat{W}_k + \hat{W}_p$ je operátor součtu kinetické a potenciální energie (tzv. Hamiltonián). Tyto výsledky jsou obsahem věty 31.6.

Schrödingerova rovnice ve tvaru (31.13) dostává ihned úplně jinou jednoduchou interpretaci. Je to podmínka pro operátor celkové energie \hat{H} , jeho vlastní hodnoty W a vlastní vlnové funkce ψ . Analogicky můžeme pro jakékoliv dvě fyzikální veličiny A a B , jejich operátory \hat{A} a \hat{B} a jejich vlnové funkce ψ_A a ψ_B napsat formálně stejné podmínkové rovnice

$$\hat{A}\psi_A = A\psi_A \quad (31.23)$$

a dále

$$\hat{B}\psi_B = B\psi_B. \quad (31.24)$$

Bez důkazu uvedeme tento cenný poznatek: jsou-li funkce ψ_A a ψ_B totožné, potom pro veličiny A a B neplatí Heisenbergova relace neurčitosti (věta 30.4), takže obě veličiny jsou současně libovolně přesně měřitelné.

S těmito i dalšími vlastnostmi kvantověmechanických operátorů se podrobněji zabýváme v kapitole 8. S konkretizací uvedeného formalismu kvantové mechaniky se setrhneme při řešení některých prakticky významných problémů mikrofyziky (kapitola 33 a 34).

Poznámka:

V tomto článku jsme použili "primární" veličiny souřadnice a jako "sekundární" hybnosti. Tak vznikla formulace kvantové mechaniky v tzv. souřadnicové reprezentaci. Můžeme však postupovat i opačně - jako primární zvolit hybnosti (potom jsou operátory hybnosti totožné s příslušnými hybnostmi) a jako sekundární zvolit souřadnice (které se odvodí z hybnosti i pomocí příslušných operátorů). Takto vybudované teorii říkáme kvantová mechanika v impulzové reprezentaci.

Další vývoj kvantové mechaniky nás nutí poněkud opravit svůj názor na obecně přijímané tvrzení, podle kterých klasická fyzika není použitelná pro mikrosvět. Ukázalo se totiž, že Schrödingerovu formulaci kvantové mechaniky můžeme "odvodit" i z čistě klasických představ, jestliže respektujeme okolnosti, za kterých se pohyb v mikrosvětě uskutečňuje. Pro objasnění tohoto tvrzení nám může posloužit následující příklad: po rovinném nakloněném svahu hustě pokrytém přibližně stejnými kameny padají dva kulové předměty - jeden s rozměry daleko převyšujícími rozměry těchto kamenů (a proto i nepoměrně těžší) a druhý s rozměry (a proto i s hmotností) porovnatelnými s těmito překážkami. I ze zákonů klasické fyziky bez problémů vyplývá, že v prvním případě bude dráhu představovat rovná spojitá čára, zatímco v druhém případě to bude složitý "cik - cak" pohyb. Stejně můžeme bez větších názorových těžkostí pochopit skutečnost, že v prvním případě má smysl mluvit o přesných hodnotách veličin určujících dráhu a hybnost předmětu, zatímco v druhém případě mohou být obě charakteristiky stanoveny jen s určitou pravděpodobností. Již i tento příklad signalizuje, že kvantová fyzika má něco společného s druhým diskutovaným příkladem. Ve skutečnosti je tomu skutečně tak. Mikrosvět je naplněn "kamínky" představujícími zdroje rozptylu při pohybu - jsou různé fluktuace vakua související s neustálým generováním par částic a antičástic a fluktuace polí. Jestliže energie pohybujících se částic daleko převyšuje energii těchto fluktuací, neprojeví se jejich přítomnost na kvalitě pohybu. To je příklad klasické mechaniky. Jestliže však energie pohybující se částice je stejného řádu, ztrácí pojem dráhy i hybnosti svůj klasický smysl a pohyb takové částice se musí popisovat se zřetelem na pravděpodobnostní charakter rozptylu na mikrofyzikálních překážkách. Ukázalo se, že vhodným slovníkem může být v tomto případě terminologie používaná v nauce o vlnění. Z tohoto hlediska názvy "vlnové" vlastnosti částic a "vlnová" mechanika nevyjadřují nic jiného než skutečnost, že k popisu pohybu mikročástice se hodí vlnový formalismus. Tak se

i nejvážnější problém kvantové fyziky - zda je mikroobjekt částice nebo vlna - stává nesmyslným. Částice zůstává částicí, ale když se pohybuje v prostředí vyplněném energeticky stejně "silnými" fluktuacemi, je nutno její pohyb popsat pomocí pojmů vžitých v nauce o vlnění.