

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
indexujeme 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:

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x,t) \quad \text{s libovolnou sadou koeficientů } c_n \text{ vyhovuje nestacionární Schr. r.}$$

- kombinováním stacionárních stavů s různými vlastními energiemi dostáváme nestacionární stavy s netriviálním časovým vývojem (přelévání hustoty pravděpodobnosti $|\psi(x,t)|^2$)

rozklad do vlastních stavů a časový vývoj určený s využitím principu superpozice

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

rozklad do stac. stavů v počátečním čase

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

sestavem 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

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

- ilustrace pro nekonečně hlubokou jámu

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

vlastní energie $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mL^2}$ $n = 1, 2, 3 \dots$

1) ortogonalita

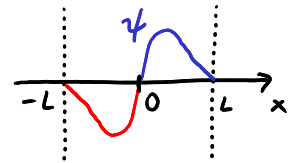
$$S_{nn'} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x) \Psi_{n'}(x) dx = \frac{2}{L} \int_0^L \sin \frac{n\pi x}{L} \sin \frac{n'\pi x}{L} dx = \frac{2}{L} \int_0^L \frac{1}{2} \left[\cos \frac{(n-n')\pi x}{L} - \cos \frac{(n+n')\pi x}{L} \right] dx$$

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

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 $a_n = 0$, $n = 0, 1, 2, \dots \rightarrow$ soubor $\Psi_n \sim \sin \frac{n\pi x}{L}$
 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 $\psi(x, 0) = c_1 \Psi_1(x) + c_2 \Psi_2(x)$

$\rightarrow$ v obecném čase t : $\psi(x, t) = c_1 \Psi_1(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} + c_2 \Psi_2(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t}$

časový vývoj hustoty pravděpodobnosti:

$$|\psi(x, t)|^2 = \psi^*(x, t) \psi(x, t) = (c_1^* \Psi_1^* e^{+\frac{i}{\hbar} E_1 t} + c_2^* \Psi_2^* e^{+\frac{i}{\hbar} E_2 t}) (c_1 \Psi_1 e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} + c_2 \Psi_2 e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t})$$

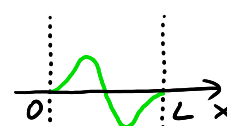
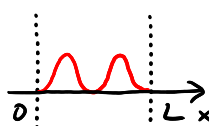
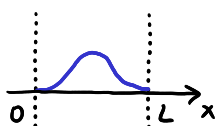
$$= \underbrace{|c_1|^2 |\Psi_1(x)|^2 + |c_2|^2 |\Psi_2(x)|^2}_{\text{statický příspěvek}} + \underbrace{c_1^* c_2 e^{\frac{i}{\hbar} (E_2 - E_1) t} \Psi_1^*(x) \Psi_2(x) + c_1 c_2^* e^{\frac{i}{\hbar} (E_1 - E_2) t} \Psi_1(x) \Psi_2^*(x)}_{\text{oscilující interferenční příspěvek (reálná část)}}$$

- normování $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = |c_1|^2 \underbrace{\int |\Psi_1|^2}_1 + |c_2|^2 \underbrace{\int |\Psi_2|^2}_1 + \dots \underbrace{\int \Psi_1^* \Psi_2}_0 + \dots \underbrace{\int \Psi_2^* \Psi_1}_0$

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

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

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



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