

## 10 Związki z mechaniką klasyczną

### 10.1 Twierdzenie Ehrenfesta

Twierdzenie Ehrenfesta mówi, że wartości oczekiwane operatorów takich jak położenie czy pęd spełniają klasyczne równania ruchu. Przypomnijmy

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi, t\rangle = \hat{H} |\psi, t\rangle, \quad -i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi, t| = \langle \psi, t| \hat{H}. \quad (10.1)$$

Zatem

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi, t| \hat{Q} |\psi, t\rangle &= -\langle \psi, t| \hat{H} \hat{Q} |\psi, t\rangle + i\hbar \langle \psi, t| \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} |\psi, t\rangle + \langle \psi, t| \hat{Q} \hat{H} |\psi, t\rangle \\ &= \langle \psi, t| [\hat{Q}, \hat{H}] |\psi, t\rangle + i\hbar \langle \psi, t| \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} |\psi, t\rangle. \end{aligned} \quad (10.2)$$

Na ogół operatory nie zależą od czasu, więc

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{Q} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle \psi, t| [\hat{Q}, \hat{H}] |\psi, t\rangle. \quad (10.3)$$

Jeżeli operator  $\hat{Q}$  komutuje z hamiltonianem, to jego wartość oczekiwana w dowolnym stanie nie zależy od czasu –  $Q$  jest zachowane. Wtedy także  $\hat{Q}^2$  komutuje z  $\hat{H}$ , a zatem dyspersja jest też zachowana.  $Q$  jest nazywane "dobrą liczbą kwantową".

Jeżeli  $|\psi, t\rangle = |E, t\rangle$  jest stanie własnym energii

$$\langle E, t| [\hat{Q}, \hat{H}] |E, t\rangle = \langle E, t| (\hat{H} \hat{Q} - \hat{Q} \hat{H}) |E, t\rangle = 0. \quad (10.4)$$

Zatem każdy (jawnie niezależny od czasu) operator  $\hat{Q}$  ma w stanie własnym energii zachowaną wartość oczekiwaną. Dlatego stany własne energii nazywane są stanami stacjonarnymi.

Dla operatora pędu

$$\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$$

mamy

$$[\vec{p}, \hat{H}] = -i\hbar \vec{\nabla} V,$$

co daje

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle = -\langle \vec{\nabla} V \rangle. \quad (10.5)$$

Jest to kwantowy odpowiednik równania Newtona. Podobnie

$$[\hat{x}, \hat{H}] = \frac{1}{2m} [\hat{x}, \hat{p}^2] = \frac{1}{2m} (\hat{p} [\hat{x}, \hat{p}] + [\hat{x}, \hat{p}] \hat{p}) = \frac{i\hbar}{m} \hat{p},$$

co daje

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle. \quad (10.6)$$

Równania Ehrenfesta są przykładem *zasady korespondencji*.

## 10.2 Twierdzenie o wiriale

Jako ilustrację wprowadzonych pojęć wyprowadzimy związek między energią kinetyczną a potencjalną. Zastosujemy twierdzenie, że średnia dowolnego operatora  $\hat{Q}$  w stanach stacjonarnych jest stała w czasie (10.4) dla operatora  $\hat{Q} = \vec{x} \cdot \vec{p}$ :

$$\begin{aligned} 0 &= i\hbar \frac{d}{dt} \langle \vec{x} \cdot \vec{p} \rangle = \langle E | [\vec{x} \cdot \vec{p}, \hat{H}] | E \rangle \\ &= \frac{1}{2m} \langle E | [\vec{x} \cdot \vec{p}, \hat{p}^2] | E \rangle + \langle E | [\vec{x} \cdot \vec{p}, V(\vec{x})] | E \rangle. \end{aligned} \quad (10.7)$$

Policzmy komutatory

$$\begin{aligned} [\vec{x} \cdot \vec{p}, \hat{p}^2] &= \sum_{j,k} [\hat{x}_j \hat{p}_j, \hat{p}_k^2] = \sum_{j,k} [\hat{x}_j, \hat{p}_k^2] \hat{p}_j =, \\ [\vec{x} \cdot \vec{p}, V(x)] &= -i\hbar \vec{x} \cdot \vec{\nabla} V. \end{aligned} \quad (10.8)$$

Dostajemy

$$2 \langle E | \frac{\hat{p}^2}{2m} | E \rangle = \langle E | \vec{x} \cdot \vec{\nabla} V | E \rangle. \quad (10.9)$$

Dla potencjałów centralnych

$$V = Cr^\alpha$$

mamy

$$\vec{x} \cdot \vec{\nabla} V(r) = r \frac{\partial}{\partial r} V(r) = \alpha V(r), \quad (10.10)$$

co daje

$$2 \langle E | \frac{\hat{p}^2}{2m} | E \rangle = \alpha \langle E | V | E \rangle. \quad (10.11)$$

Dla oscylatora  $\alpha = 2$ , zatem energia kinetyczna i potencjalna są równe. Dla potencjału Coulomba  $\alpha = -1$ , zatem suma podwojonej energii kinetycznej i energii potencjalnej jest równa 0. Lub inaczej: całkowita energia jest równa minus energii kinetycznej.

## 10.3 Gęstość prądu prawdopodobieństwa

Całkowite prawdopodobieństwo znalezienia cząstki gdzieś w przestrzeni wynosi 1, a zatem:

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1. \quad (10.12)$$

Jest to tzw. warunek normalizacyjny dla funkcji  $\psi$ . Oznacza on w gruncie rzeczy, że całka (10.12) jest skończona; rzeczywiście wówczas zawsze można dobrać pewną stałą  $c$ :  $\psi \rightarrow \psi' = \psi/c$ , że funkcja  $\psi'$  ma normę równą 1. Warunek (10.12) oznacza, że w nieskończoności  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$  znika na tyle szybko, że całka po  $dV$  jest skończona. W myśl interpretacji

statystycznej oznacza to, że cząstka jest zlokalizowana w przestrzeni. Warto jeszcze zauważyć, że pomnożenie funkcji  $\psi$  przez fazę  $e^{i\theta}$  nie zmienia gęstości prawdopodobieństwa, a zatem z fizycznego punktu widzenia funkcje

$$\psi \quad \text{i} \quad e^{i\theta}\psi$$

są równoważne.

O funkcjach spełniających (10.12) mówimy, że są całkowalne w kwadracie.

Zauważmy, że formalnie całka (10.12) jest funkcją czasu. Ale aby interpretacja statystyczna miała sens, warunek normalizacyjny (10.12) powinien być spełniony dla każdej chwili  $t$ , czyli powinien być niezależny od  $t$ :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int P(\vec{r}, t) dV = \frac{\partial}{\partial t} \int |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 0. \quad (10.13)$$

W całce po  $dV$  ograniczymy się najpierw do skończonego obszaru  $V$ , który następnie „rozedmiemy” do nieskończoności. Wchodząc z pochodną po czasie pod całkę otrzymujemy

$$\int_V \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right) dV = \frac{1}{i\hbar} \int_V \left( \psi^* \hat{H} \psi - \psi \hat{H}^* \psi^* \right) dV,$$

gdzie ostatnia równość wynika z równania Schrödnigera. Ponieważ  $\hat{H} = -\hbar^2/2m \vec{\nabla}^2 + V$ , gdzie  $V$  jest rzeczywistą funkcją położenia, człony z  $V$  kasują się i otrzymujemy

$$\frac{i\hbar}{2m} \int_V \left( \psi^* \vec{\nabla}^2 \psi - \psi \vec{\nabla}^2 \psi^* \right) dV = \frac{i\hbar}{2m} \int_V \vec{\nabla} \cdot \left( \psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right) dV. \quad (10.14)$$

Do ostatniej całki zastosujemy twierdzenia Gaussa

$$\int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{S} dV = \int_{\partial V} d\vec{a} \cdot \vec{S}, \quad (10.15)$$

gdzie  $d\vec{a}$  jest skierowanym elementem powierzchni, a  $\partial V$  oznacza brzeg obszaru  $V$ . Oznaczając

$$\vec{S} = -\frac{i\hbar}{2m} \left( \psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right) \quad (10.16)$$

i stosując (10.15) do ostatniej całki po  $dV$  w (10.14) mamy ostatecznie

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = - \int_{\partial V} d\vec{a} \cdot \vec{S}.$$

Jeśli funkcja  $\psi$  znika dla dużych  $\vec{r}$  to w granicy  $\partial V \rightarrow \infty$  znika także całka po powierzchni i otrzymujemy wzór (10.13).

Wyrażenia (10.13) i (10.14) można przepisać w postaci

$$\int_V \left( \frac{\partial}{\partial t} P(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{S} \right) dV = 0. \quad (10.17)$$

Ponieważ (10.17) jest spełnione dla każdego  $V$ , musi zachodzić *równanie ciągłości*:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{S} = 0. \quad (10.18)$$

Równanie to jest identyczne z równaniem dla cieczy, gdzie  $P$  oznacza gęstość cieczy, a wektor  $\vec{S}$  gęstość prądu (w przypadku cieczy  $\vec{S} = P \vec{v}$ , gdzie  $\vec{v}$  jest prędkością cieczy). Stąd (10.16) nazywamy gęstością prądu prawdopodobieństwa.

## 11 Rozpraszanie w jednym wymiarze

W nierelatywistycznej mechanice kwantowej rozpraszanie rozumiemy jako proces zmiany funkcji falowej opisującej rozpraszany obiekt przy przejściu przez obszar działania znanego potencjału. W rzeczywistości źródłem potencjału jest inny obiekt, np. jądro atomowe w tzw. tarczy. Pełny opis uwzględniający ten fakt możliwy jest dopiero w relatywistycznej mechanice kwantowej.

Choć na pierwszy rzut oka wydaje się, że rozpraszanie cząstki na pewnym potencjale powinno być opisywane przy pomocy równania Schrödingera zależnego od czasu, to w praktyce stosuje się równoważny opis stacjonarny. Odpowiada to założeniu, że z nieskończoności nadbiega na zlokalizowany potencjał ciągły strumień cząstek. W przypadku jednowymiarowym cząstki te z pewnym prawdopodobieństwem odbijają się od potencjału oraz przechodzą „na drugą” stronę. Mamy więc do czynienia jeszcze z dwoma strumieniami: odbitym i przechodzącym. Zakładając, że potencjał jest zlokalizowany wokół  $x = 0$  funkcje falowe dla  $x \ll 0$  lub  $x \gg 0$  opisywane są przez fale płaskie. Funkcja falowa cząstki padającej (z lewa na prawo)

$$\Psi_p(x) = A e^{-iEt/\hbar} e^{+ikx} \text{ dla } x \ll 0 \quad (11.19)$$

Funkcja falowa stanu końcowego: odbicie i przejście przez potencjał

$$\begin{aligned} \Psi_k(x) &= B e^{-iEt/\hbar} e^{-ikx} \text{ dla } x \ll 0 \\ &+ C e^{-iEt/\hbar} e^{+ikx} \text{ dla } x \gg 0. \end{aligned} \quad (11.20)$$

W podejściu stacjonarnym musimy zatem rozwiązać równanie Schrödingera z warunkami brzegowymi

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A e^{+ikx} + B e^{-ikx} \text{ dla } x \ll 0 \\ \psi(x) &= C e^{+ikx} \text{ dla } x \gg 0. \end{aligned} \quad (11.21)$$

Zauważmy, że energia jest tu zachowana, nie zostaje ona przekazana „tarczy”, stąd to samo  $k$  we wszystkich kawałkach funkcji falowej.

Warunki (11.21) potraktujemy jako warunki brzegowe dla równania Schrödingera opisujące cząstkę o masie  $m$  o dodatniej energii

$$E = \frac{k^2}{2m\hbar^2}, \quad (11.22)$$

które wygodnie zapisać w postaci (w dowolnej liczbie wymiarów):

$$(\nabla^2 + k^2) \psi(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{r}) \psi(\vec{r}). \quad (11.23)$$

Sens fizyczny współczynników  $A$ ,  $B$  i  $C$  można odczytać rozważając gęstość prądu  $S(x)$  z równania ciągłości

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial x} = 0 \quad (11.24)$$

$$S(x) = -\frac{i\hbar}{2m} \left( \psi^*(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} - \psi(x) \frac{\partial \psi^*(x)}{\partial x} \right) \quad (11.25)$$

dla  $x \ll 0$

$$S(x) = -\frac{i\hbar}{2m} (|A|^2 ik - |B|^2 ik) = \frac{p}{2m} (|A|^2 - |B|^2) = v (|A|^2 - |B|^2) \quad (11.26)$$

i dla  $x \gg 0$

$$S(x) = v |C|^2, \quad (11.27)$$

gdzie  $v$  jest prędkością cząstki. Interpretacji poddają się jedynie stosunki

$$\left| \frac{B}{A} \right|^2, \quad \left| \frac{C}{A} \right|^2 \quad (11.28)$$

wsp. odbicia i przejścia, dlatego absolutna normalizacja jest nieistotna. Wygodna „norma”  $A = 1/\sqrt{v}$ , wówczas padający strumień wynosi 1.

Przejście nad potencjałem i tunelowanie.